

UNIVERSIDAD DE CHILE FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA

ESTUDIO DE LA DEFORMACIÓN EN IMPACTO EN EL PROCESO DE COLD SPRAY

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL MECÁNICO

FELIPE RODRIGO BARRIENTOS LAURY

PROFESOR GUÍA

RUBÉN MARCOS FERNÁNDEZ URRUTIA

MIEMBROS DE LA COMISIÓN ALEJANDRO ORTIZ BERNARDIN ALEJANDRO VARGAS USCATEGUI

SANTIAGO DE CHILE

2018

RESUMEN DE LA MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL MECÁNICO POR: FELIPE RODRIGO BARRIENTOS LAURY AÑO 2018 PROFESOR GUÍA: RUBÉN MARCOS FERNANDEZ URRUTIA ESTUDIO DE LA DEFORMACIÓN EN IMPACTO EN EL PROCESO DE COLD SPRAY

Cold Spray es un proceso de manufactura aditiva en estado sólido, consistente en la deposición de material particulado en un substrato a altas velocidades. La gran ventaja de este proceso con respecto a otros procesos de *Thermal Spray* es que requiere de temperaturas de deposición bajo el punto de fusión, evitando problemas de difusión de gases y cambios microestructurales que limiten el rango de utilización de este proceso, además de disminuir la cantidad de calor necesario para realizar la adhesión.

El objetivo principal de este trabajo de título fue estudiar la deformación por impacto de partículas de níquel y titanio en el proceso de *Cold Spray* a través de simulaciones numéricas. Los objetivos específicos fueron establecer una relación entre velocidad de impacto, temperatura y ángulo de impacto, con la adhesión de partículas con un substrato; analizar el impacto de las partículas con substratos de un mismo o diferente material; y determinar variables que permitan una deposición efectiva.

Se realizaron simulaciones de impacto de una partícula esférica de 20 $[\mu m]$ y un substrato, utilizando níquel y titanio. Se usaron como variables, las propiedades de los materiales, la temperatura, velocidad y ángulo antes del impacto, para obtener los esfuerzos, deformación y temperatura durante el impacto.

Como recurso para realizar este trabajo de título, se trabajó con el software *Abaqus/Explicit*, con su módulo de análisis *Abaqus/Explicit* con un mallado *Arbitrary Lagrangian Eulerian*, para evitar la deformación excesiva.

En total, se realizaron 40 simulaciones de impacto, analizados con 2 métodos distintos; el primero investigó la presencia de *ASI (Adiabatic Shear Instability)*, no implicando la adhesión de la partícula con el substrato. El otro método logró obtener diferencias visibles a distintas velocidades (alrededor de los 500 y 600 [m/s] en los casos de níquel sobre níquel y titanio sobre titanio, y entre 600 y 700 [m/s] en los casos de níquel sobre níquel).

A distintas temperaturas, aumentó la energía de adhesión a mayores temperaturas, y a distintos ángulos de impacto (disminuyendo la adhesión con un mayor ángulo de impacto).

Si bien, las velocidades críticas logradas para níquel y titanio resultaron menores que las estimadas por la literatura [15] [28] [29], los resultados de la literatura estudiaron la presencia de *ASI*, lo cual no implica adhesión. Por lo tanto, existe la posibilidad de que los resultados obtenidos en este trabajo de título sean ciertos, sólo necesitarían demostración experimental para confirmar las velocidades críticas.

Agradecimientos

Primero, quiero agradecerle a mi profesor guía, Rubén, este trabajo no sería posible sin su ayuda, prestando auxilio en todo momento. También agradecerle a la Universidad de Ottawa, por prestar sus servicios y habilitarme a usar sus equipos para realizar este trabajo de título. Agradecimientos a mi comisión por estar disponibles para prestar ayuda.

Gracias a Beauchef la posibilidad de poder desarrollarme como estudiante universitario, por permitirme saber que hay un mundo más grande y variado, que recién estoy empezando a conocer.

Agradecimientos a Diego Piña y a Cony Espinoza por ser grandes amigos y por ayudarme en los buenos y malos momentos, ustedes son fabulosos. Le agradezco a Iván Canales y sus amigos, el estar ahí cuando me faltaba compañía, también son fabulosos. Agradecerle a Patricia Norambuena, sin tu compañía, no sé qué habría sido de mí. Gracias a los cabros de la sala de memoristas, por ser geniales, apreciar la *pasta* y *Boku No Hero Academia*. Agradecimientos especiales a los cabros de *Perro Meado*, por ser brutales, tiernos y apañar en todas.

Gracias a la serie *CART* e *Indycar* por hacer que me gustaran las carreras de autos y por entusiasmarme a estudiar ingeniería mecánica. Es muy poco probable que termine trabajando en autos de carrera, pero me sigue gustando verlas. Le agradezco al *rock* y al *metal* por ser buena música y seguir teniendo fuerza sin importar las generaciones, cada momento puede tener una canción.

Por último, gracias especiales a mi familia, especialmente a mi mamá y papá por estar ahí conmigo y dándome fuerzas todo este tiempo, les pido perdón por no llamar todos los días, pero los quiero de corazón.

Tabla de Contenido

1.	Intro	troducción1		
2.	Objetivos			
2	.1.	Objetivo General		
2	.2.	Obj	jetivos Específicos	2
3.	Alca	ances	S	3
4.	Ante	Antecedentes		
4.1. Plasma Spray		6		
4	.2.	Hig	gh Velocity Oxygen Fuel (HVOF) Spray	7
4	.3.	Elec	ctric Arc Spraying	7
4	.4.	Col	ld Gas Dynamic Spraying (CGDS)	8
	4.4.	1.	Impacto y deformación	8
	4.4.2	2.	Mecanismos de Adhesión	11
	4.4.	3.	Velocidad Crítica	12
	4.4.4	4.	Aplicaciones de Cold Spray	16
	4.4.:	5.	Modelamiento	16
	4.4.0	5.	Mallado ALE.	
5.	Met	odolo	ogía	21
5	.1.	Val	lidación de Modelo	21
5	.2.	Prue	eba de Sensibilidad de Malla	23
5	.3.	Tral	bajo con Níquel y Titanio	23
5	.4.	Mét	todos de Análisis	27
	5.4.	1.	Método de Nikbakht	
	5.4.2	2.	Método de Kurochkin y Wu	
5	.5.	Adq	quisición de datos	29
	5.5.	1.	Método de Nikbakht	31
	5.5.2	2.	Método de Kurochkin y Wu	
6.	Res	ultad	los, Análisis y Discusiones	
6	.1.	Val	lidación de Modelo	
6	.2.	Sen	nsibilidad de Mallado	
6	.3.	Tral	bajo en Níquel y Titanio	
	6.3.	1.	Resultados de Simulaciones según Velocidad de Impacto	

	6.3.2.	Resultados de Simulaciones según Temperatura de Impacto	. 39
	6.3.3.	Resultados de Simulaciones según Ángulo de Impacto	. 44
	6.3.4.	Análisis de Método de Nikbakht	. 49
	6.3.5.	Análisis de Método Kurochkin y Wu	. 51
7.	Conclusiones.		
8.	Bibliografía6		
9.	Anexos		

1. Introducción

Los recubrimientos de materiales son aplicados para reforzar o adquirir nuevas propiedades para estas capas. Un método reconocido de manufactura para realizar recubrimientos son los procesos de *Thermal Spray* [1], consistente en calentar partículas bajo o sobre su punto de fusión para ser aceleradas, a través de un flujo de gas, en dirección hacia un substrato, produciendo un impacto entre las partículas y el substrato.

Los procesos de *Thermal Spray* permiten el uso de materiales metálicos en estado puro, aleaciones, polímeros, cermets y cerámicos [2]. A pesar de la flexibilidad de materiales potenciales a usar, se encuentran ciertos defectos en el resultado, proveniente del cambio de estado por fusión y solidificación, implicando problemas como contracciones, grietas, cambios de fase intermetálicos, difusión de oxígeno lo que lleva a corrosión de las capas, etc [3].

Un método de recubrimiento a base de *Thermal Spray* es el llamado *Cold Gas Dynamic Spraying (CGDS)* [2] o más conocido como *Cold Spray* [4], considerado un proceso de manufactura en estado sólido [4], debido a que se trabajan con partículas depositadas a temperaturas menores a las temperaturas de fusión, reduciendo las posibilidades de problemas por cambios de fase indeseados, grietas y difusión de gases.

Lo anterior, conlleva un gran incentivo a la utilización de este método para la generación de recubrimientos de piezas que necesiten alta resistencia a la corrosión, abrasión y sin grandes cambios microestructurales.

Se realizan estudios con respecto a *Cold Spray* con el objetivo de conocer cuál es la física detrás del proceso de deposición y cuáles son los mecanismos detrás de la adhesión de partículas con el substrato. Esto con el fin de buscar cuáles son las variables necesarias para optimizar la deposición.

Este trabajo de título consistió en el estudio de la deformación de las partículas, debido al impacto con el substrato en el proceso de *Cold Spray* a través de simulaciones numéricas que pueda determinar la presencia de ciertos fenómenos implicados en *Cold Spray*, y que pueda determinar una relación entre parámetros de entrada, como velocidad, ángulo de impacto, temperatura y material, con parámetros de salida, como la deformación, el esfuerzo, temperatura de impacto y otros más.

2. Objetivos

2.1. Objetivo General

Estudiar la deformación por impacto de partículas esféricas de níquel y titanio en el proceso de *Cold Spray* a través de simulaciones numéricas.

2.2. Objetivos Específicos

- Analizar la influencia de la velocidad de impacto y ángulo de impacto en la adhesión de partículas con el substrato.
- Analizar la influencia de la temperatura de la partícula antes del impacto en la adhesión de partículas.
- Comparar dos métodos distintos para investigar la adhesión de partículas.
- Estudiar el comportamiento de dos materiales distintos.

3. Alcances

Dentro de este trabajo de título, se definieron los siguientes alcances.

- A pesar de que la tasa de deposición en *Cold Spray* puede llegar a ser de decenas de millones de partículas por segundo, este trabajo de título, solamente contempló el estudio del impacto de una partícula sobre un substrato.
- Se estudiaron 2 materiales en forma de partícula y substrato, estos materiales son níquel y titanio.
- El tamaño de la partícula usada fue de 20 [µm] de diámetro.
- Se realizó un análisis numérico, abarcando las áreas de mecánica de sólidos y transferencia de calor.
- No se consideró la existencia de transferencia de calor entre la partícula y el substrato, ni el conjunto partícula-substrato con el ambiente; si bien existe, es un efecto despreciable en *Cold Spray*.
- Se consideró nula la velocidad transversal, ya que la velocidad de avance es despreciable con respecto a la velocidad de deposición.
- Se consideró nula la aceleración gravitacional, puesto que se vuelve despreciable con altas velocidades de impacto.
- La dirección de impacto fue realizada con 4 ángulos distintos: 0, 30, 45 y 60 °.
- Se realizaron mediciones con 5 distintas velocidades, desde los 400 a los 800 [m/s].
- Se realizaron mediciones con distintas temperaturas previo al impacto; 298,15 [K], 600 [K] y 900 [K].
- Se consideró una superficie de substrato lisa.
- Las simulaciones sólo tuvieron en cuenta impactos en 2-D, ya que las partículas eran esféricas, con un efecto simétrico en dirección transversal.
- El 100% del trabajo plástico por el impacto se transformó en calor.

4. Antecedentes

La tecnología de recubrimiento de piezas tiene un amplio uso en áreas de la medicina; en la utilización de implantes de titanio de alta dureza, industria automotriz para piezas de motores [5], generación de energía [6], etc.

Para la generación de energía, se puede ver el uso de *Thermal Spray* para la protección de álabes para turbinas a gas; con el uso de superaleaciones como el Inconel-718, una aleación de níquel, cromo y molibdeno, como medio de protección ante la corrosión y desgaste. Otro uso es en el área de la medicina, es en el área de implantes de material óseo, necesitando altas propiedades en contra del desgaste y la corrosión [6]. Otro caso, eso el uso de los nitinoles [7] [8], material superelástico y con memoria de forma, apto para la fabricación de herramientas quirúrgicas [7].

Dentro de la gama de tecnologías para generar recubrimientos de alto espesor, *Thermal Spray* es un proceso de manufactura, consistente en partículas calentadas y rociadas, por acción de un gas, que impactan una superficie o substrato, permitiendo la formación de una nueva capa de material. *Thermal Spray* es un tratamiento superficial para piezas que necesiten resistencia a la corrosión, adhesión y a altas temperaturas.

Las partículas rociadas en los procesos de *Thermal Spray*, comúnmente, llamadas *splats*, son gotas fundidas o semifundidas que impactan una superficie y solidifican rápidamente alrededor de los 10⁹ [°C/s], producto de la diferencia de tamaño entre los *splats* y la superficie de impacto [9].

Aunque cada tipo de Thermal Spray cuenta con su propio sistema de inyección de partículas, a continuación se mencionan los elementos que comúnmente están incorporados en los sistemas de inyección de partículas.

- Gas transportador.
- Sistema de impulsión de gas. Ejemplo, cilindros neumáticos.
- Alimentador de partículas. Zona donde se alimenta el gas con partículas.
- Calentador de gas y/o partículas. Puede ser plasma, arco eléctrico, combustión o incluso resistencias eléctricas.
- Boquilla. Zona de salida del gas con partículas hacia el substrato.
- Sistema de movimiento de boquilla y substrato.

A continuación, se mencionan algunos procesos de Thermal Spray.

- Plasma Spray. Las partículas son fundidas por un gas ionizado por un arco eléctrico.
- **High Velocity Oxygen Fuel (HVOF).** Las partículas son aceleradas por la combustión entre oxígeno y un combustible, calentando y acelerando las partículas.
- Electric Spray. Las partículas son calentadas por un arco eléctrico, producido por cables consumibles.
- **Cold Spray.** Las partículas son transportadas por un gas inerte, calentado a una temperatura menor que la temperatura de fusión de las partículas. Sin embargo, al aumentar la temperatura del gas, aumenta su presión, y en el momento en que el gas pasa por una tobera, es acelerado hasta alcanzar velocidades entre los 300 a los 1200 [m/s].

Como los procesos de *Thermal Spray*, depositan partículas a una temperatura mayor a la temperatura de fusión, se incrementan las posibilidades de difusión de gases y cambios microestructurales, debilitando las propiedades mecánicas del resultado final.

La excepción al caso, es el proceso de *Cold Spray*, cuyo gas es calentado a temperaturas menores a las temperaturas de fusión de las partículas inyectadas. La Figura 4.1 muestra resultados de las superficies después de ser sometidas a cada proceso de *Thermal Spray* mencionados anteriormente, mostrando como el *Electric Spray* y el *Plasma Spray* generan mayor cantidad de cavidades y grietas, mientras que *Cold Spray* obtiene una superficie con menos cavidades.



Figura 4.1. Recubrimientos de Thermal Spray. a) Electric Spray, b) Plasma Spray, c) HVOF y d) Cold Spray [10].

Otra ventaja en el proceso de *Cold Spray*, es la versatilidad de los rangos de velocidades que las partículas pueden adquirir, desde los 350 [m/s] hasta los 1200 [m/s] a temperaturas menores a los 1000 [°C] [11]. En cambio, el *Electric Spray* y el *Plasma Spray* tienen un rango entre los 50 a 150 [°C] y 350 a 650 [°C], respectivamente [11]. Los rangos de velocidades y temperaturas se para los procesos de *Thermal Spray* se pueden ver en la Figura 4.2 [11].



Figura 4.2. Rangos de velocidades y temperaturas de procesos de Thermal Spray [11].

4.1. Plasma Spray

Partículas en forma de polvos son aceleradas y fundidas (o parcialmente fundidas, dependiendo del material) por un flujo de gas ionizado (plasma). Generalmente, el flujo de plasma se forma cuando un gas es calentado, mientras pasa por un arco eléctrico, formado por un ánodo y un cátodo, dispuestos de forma concéntrica como se indica en la Figura 4.1.

Normalmente, el gas utilizado en este proceso es una mezcla de H₂-Ar-He, debido a su alta conductividad térmica [6]. El plasma es acelerado a velocidades menores de 300 [m/s], pero a temperaturas entre 10.000 a 14.000 [K], resultando en la fundición del material en forma de polvo. Esto puede traer problemas por difusión de oxígeno, generando oxidación del material al momento de inyección [6], lo que ha llevado a modificaciones de este método para reducir las posibilidades de oxidación, como lo son el *Vacuum Plasma Spray* o el *Low Pressure Plasma Spray*, evitando o disminuyendo la concentración de oxígeno en el medio.



Figura 4.3: Esquema de Plasma Spray [5].

4.2. High Velocity Oxygen Fuel (HVOF) Spray

Se asimila al *Plasma Spray* en el sentido de la aceleración de partículas a través de un gas, sólo que en este caso el flujo de gas nace producto de una combustión de una mezcla de oxígeno y combustible (Propano, Polipropileno, Metano, etc) a altas presiones, típicamente a 1,35 [MPa], en donde las partículas alcanzan los 1000 [m/s], a pesar de alcanzar menores temperaturas que el *Plasma Spray*, las temperaturas siguen siendo lo suficientemente altas para alcanzar cambios microestructurales por las altas temperaturas alcanzadas [5].



Figura 4.4: Esquema HVOF [12].

4.3. Electric Arc Spraying

Método conformado por cables consumibles y eléctricos, produciendo un arco eléctrico, calentando un gas inerte que transporta y funde las partículas para ser depositadas en un substrato. La temperatura a la que llega el arco eléctrico va desde los 3000 a los 6000 [°C] [1]. La velocidad del gas que impulsa las partículas va desde los 50 a los 150 [m/s] [2].



Figura 4.5. Esquema Electric Spray [13].

4.4. Cold Gas Dynamic Spraying (CGDS)

El proceso de *Cold Gas Dynamic Spraying* o comúnmente llamado *Cold Spray*, fue re-descubierto a mediados de 1980 en el Instituto de Mecánica Teórica y Aplicada de la División Siberiana de la Academia Rusa de Ciencias de Rusia en Novosibirsk. Mientras realizaban estudios de flujos supersónicos en un túnel de viento, los investigadores se percataron que al aumentar la velocidad del flujo, por consiguiente, se aumentó la velocidad de las partículas. Mientras las partículas impactaban el substrato, rompieron la capa de óxido del substrato y las partículas, y se produjo la adhesión de las partículas con el substrato [4].

Cold Spray es un proceso de manufactura de deposición de partículas en un substrato, la deposición se produce por la aceleración de un gas inerte a velocidades supersónicas. El gas inerte a alta presión mueve un alimentador de partículas, mientras el gas es calentado en otra sección por una resistencia térmica, y posteriormente acelerado por una tobera De Laval y así mover las partículas alimentadas hacia la tobera. Esto dice que el proceso requiere del uso de energía cinética más que energía en forma de calor para la deposición [4], por ende, este proceso se produce en estado sólido, ya que las partículas no alcanzan la temperatura de fusión, lo cual evita problemas de difusión de oxígeno, al igual que cambios microestructurales [4].



Figura 4.6. Esquema de proceso de Cold Spray [14]



La adhesión se produce por la transformación de la energía cinética de las partículas en trabajo por deformación. Como primer efecto, la deformación por impacto rompe las capas de óxido que se encuentran sobre el substrato y las partículas, luego, la alta deformación produce un alza de temperatura de las partículas y el substrato, generando un ablandamiento del substrato y las partículas para que las partículas se adhieran al substrato. Cabe mencionar que según Assadi [15], el alza de temperatura se debe producto de un trabajo por deformación adiabático, ya que la deformación y las alzas de temperatura resultan ser muy rápidos con respecto a la transferencia de calor producida en el material, Assadi [15] explica este comportamiento a través de la *Adiabatic Shear Instability (ASI)*.

Adiabatic Shear Instability (ASI) es un fenómeno térmo-viscoplástico donde se localiza una deformación y ablandamiento debido a que el material no puede disipar calor. En un proceso cuasiestático (isotérmico), el trabajo por deformación plástica, por lo que sólo se produce endurecimiento por trabajo en frío. Si el proceso fuera adiabático, no se produciría transferencia de calor, entonces la energía de deformación se transforma en un alza de temperatura, provocando el ablandamiento del material y reduciendo el esfuerzo necesario para la deformación del material. Como el ablandamiento se produce de manera localizada, este fenómeno adiabático no es de tipo homogéneo en el material, sea ya por un gradiente de temperatura o la heterogeneidad del material (alguna imperfección). Esto lleva a inestabilidades dentro del material, donde se producen zonas de mayor deformación [15].



Figura 4.7. Gráfico Esfuerzo vs Deformación, según comportamiento termodinámico [4].

Investigadores han propuesto distintos métodos para determinar la presencia de ASI, Staker [16] propuso que ASI se produce con la condición de la Ecuación (4.1), cuando el esfuerzo σ deja de aumentar, facilitando la futura deformación, y por lo tanto, aumentando la temperatura de la zona.

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon} = 0 \tag{4.1}$$

En *Cold Spray*, investigaron la variación de la temperatura en el tiempo de impacto, buscando la zona en que comienza el punto de transición [17], el cual determina el comienzo de *Adiabatic Shear Instability*, esta zona se denominó *Thermal Boost Up Zone (TBZ)*. La Figura 4.6 se muestra una curva de temperatura en el tiempo, mostrando el punto de transición y la *Thermal Boost Up Zone (TBZ)* [17].



Figura 4.8. Gráfico de Temperatura [K] vs tiempo [ŋs], mostrando la TBZ [17].

La ASI también se puede observar cuando la curva de esfuerzo en el tiempo comienza a decrecer al mismo tiempo en que se llegó al punto de transición [16] [17] [18].



Figura 4.9. Temperatura [K] y Esfuerzo de Von Mises [MPa] en el tiempo [19].

En *Cold Spray*, existe una zona en que se produce alta deformación al punto de pasar de una deformación plástica a una deformación viscoelástica [15], esta zona es denominada *jet*, una zona donde se produce la extensión de la superficie de la partícula y el substrato. Dykhuizen [20] afirmó que en esta zona se produce fusión entre la partícula y el substrato, afirmación que todavía está abierta a debate [23], ya que no hay pruebas experimentales que puedan afirmar este cambio de estado, debido a los tiempos de impacto del orden de nanosegundos y al tamaño de partículas del orden de micrómetros.

Hassani-Gangaraj [24] afirmó que la formación de jet no es necesariamente producto de *ASI*, sino que se produce por ser una zona libre de esfuerzos de compresión en dirección horizontal. La Figura 4.10 muestra que el jet se expande horizontalmente, mientras que hacia arriba se expande la onda de choque y hacia abajo hay fuerzas de reacción del substrato.



Figura 4.10. Esquema de formación de jet. En rojo se muestran los esfuerzos de compresión y en azul se muestran los esfuerzos de expansión [24].



Figura 4.11. Partícula depositada por Cold Spray y su respectivo jet [20].

4.4.2. Mecanismos de Adhesión

Cuando la partícula impacta el substrato, esta puede adherirse o rebotar, hasta el momento se da por hecho la existencia de dos mecanismos distintos, no excluyentes, por el que se puede realizar la adhesión [9], uno es la adhesión mecánica y el otro es la adhesión metálica. Que se de uno y/u otro mecanismo se determina según los materiales, las condiciones ambientales y las velocidades de impacto [20] [25].

La adhesión mecánica se produce por un efecto de gancho que se forma cuando el jet de una partícula es deformado por el impacto de otra partícula, haciendo que el jet se tenga que conectar dentro del substrato como una especie de gancho. Este fenómeno de gancho es llamado *mechanical interlocking* [15].



Figura 4.12.a) Esquema de formación de jet en forma de ganchos [18]. b) Fotografía de adhesión mecánica de partículas de cobre y substrato de aluminio [18].

La adhesión metálica o metalúrgica es producto de la difusión de material entre las partículas y el substrato, generando interfases intermetálicas de material de particulado y substrato. Pero como la mayoría de los substratos contienen óxidos en su superficie, se necesita de altas fuerzas o presiones para romper estas capas, Alidokht [26] afirmó que este es el mecanismo de mayor presencia y mayor fuerza dentro de *Cold Spray*.

4.4.3. Velocidad Crítica

A grandes rasgos, la velocidad crítica, es la velocidad mínima para que las partículas rompan la capa de óxido sobre el substrato y logren adherirse al substrato de forma exitosa, lo cual, resulta ser un concepto ambiguo en el sentido de que esta velocidad es muy compleja de calcular; no solamente depende del material de la partícula ni el substrato, sino que también depende de la rugosidad, la temperatura de impacto, la forma que tenga la partícula, el espesor de la capa de óxido que necesita romper antes de generar la adhesión con el substrato, etc.

En los casos de impactos balísticos, que son análogos a *Cold Spray*, definen la velocidad crítica como la velocidad mínima para la formación de jet [27]. Grujicic [28] y Assadi [15] postularon en sus primeros trabajos numéricos que la velocidad crítica es la velocidad en que se produce *Adiabatic Shear Instability (ASI)*. En la Tabla 4.1 se muestran velocidades críticas de algunos materiales según los estudios de Assadi [15] y Grujicic [28].

Sin embargo, en otros estudios se ha llegado al acuerdo de que la velocidad crítica se produce cuando hay una eficiencia de 50 % de deposición, esto se esquematiza en la Figura 4.15. Además, se habla de una velocidad crítica máxima, que al ser superada se produce erosión en el substrato, llegando a generar grietas en la zona [29]. Las velocidades críticas obtenidas por este tipo de estudios se muestran en la Tabla 4.2 [29].

Dartícula	Sustrato	Velocidad crítica [m/s]		
T al tícula	Sustrato	Assadi [15]	Grujicic [28]	
Cobre	Cobre	570-580	575-585	
Aluminio	Aluminio	760-770	760-770	
Níquel	Níquel	600-610	620-630	
Acero 316L	Acero 316L	600-610	620-630	
Titanio	Titanio	670-680	650-670	
Cobre	Aluminio	-	510-530	
Aluminio	Cobre	-	600-630	
Cobre	Níquel	-	570-580	
Níquel	Cobre	-	570-580	
Cobre	Acero 316L	-	570-580	
Acero 316L	Cobre	-	570-580	
Cobre	Titanio	-	520-550	
Titanio	Cobre	-	570-590	

Tabla 4.1. Velocidades críticas obtenidas de simulaciones numéricas.



Figura 4.13. Esquema de la eficiencia de deposición velocidad crítica para la adhesión de una partícula [29].

Material	Velocidad Crítica [m/s]
Aluminio	620-660
Titanio	700-890
Zinc	360-380
Acero 316L	700-750
Cobre	460-500
Níquel	610-680

Tabla 4.2. Velocidades críticas de diferentes materiales logradas a través de métodos experimentales [29].

Algunos investigadores [15] [29] [30] [31] han tratado de definir la velocidad crítica de los materiales a base de ecuaciones dependientes de parámetros como la velocidad de impacto, tamaño de partícula, propiedad de los materiales y temperatura de contacto. No obstante, ninguna de estas ecuaciones utiliza variables de salida. Otros investigadores utilizan variables de salida como el coeficiente de restitución [18] [30], área y tiempo de contacto, fuerza de adhesión [32] [33] e incluso comparaciones entre energía de rebote y energía de adhesión [34].

Kurochkin [33], usando como base el proceso de *High Velocity Oxygen Fuel (HVOF)*, desarrolló una ecuación que permitió calcular el porcentaje de adhesión a% para el proceso de *Cold Spray*, esta es la Ecuación 4.2, la cual utiliza como variables la velocidad antes del contacto v_p y temperatura antes del contacto *T*. Wu [34] utilizó la Ecuación 4.2 [33] para después obtener la energía de adhesión *A*, con respecto al área y tiempo de contacto (S_c y t_c , respectivamente), obteniendo la Ecuación 4.4 [34].

$$a\% = 1 - \exp\left[-\upsilon t_{\mathcal{C}} exp\left(\frac{-E_a}{KT + \frac{(1-e_r)m_a v_p^2}{2}}\right)\right]$$
(4.2)

Donde E_a es la energía de activación de los enlaces químicos formados en el impacto, v es la frecuencia natural de la red cristalina del material, K es la constante de Boltzmann, m_a es la masa atómica de la partícula, definida como m_a = masa atómica/N° de Avogadro, y e_r es el coeficiente de restitución de energía.

$$e_r = e_c^2 = \left(\frac{v_r}{v_p}\right)^2 \tag{4.3}$$

Donde e_c es el coeficiente de restitución por momentum y v_r es la velocidad de la partícula después del impacto.

$$A = a\% A_{max} \tag{4.4}$$

$$A_{max} = S_C N_a E_1 \tag{4.5}$$

Donde A_{max} es la máxima energía de adhesión, suponiendo que a% es igual a 1 [34]. N_a es la cantidad de átomos en el plano cristalino y E_1 es la energía de unión entre dos átomos, evaluada por la energía de sublimación del material [34]. Y por último, Wu [34] comparó la energía de adhesión

A con respecto a la energía de rebote R; como la energía de adhesión se definió como la máxima energía necesaria para despegar la partícula, entonces, si la energía de rebote R es mayor que la energía de adhesión A, la partícula no alcanza a adherirse al substrato.

$$R = \frac{1}{2} e_r \rho_p V_p v_p^2 \tag{4.6}$$

Donde ρ_p y V_p son la densidad y volumen de la partícula, respectivamente. En las investigaciones de Wu [37], se ha visto un rango de velocidad, encontrándose una velocidad mínima (velocidad crítica) y una velocidad máxima en que la energía de adhesión *A* es mayor que la energía de rebote *R*. La existencia de una velocidad máxima indicó la posibilidad de que se generara erosión en vez de adhesión, como se puede visualizar en la Figura 4.15.





Figura 4.15. Partículas de aluminio depositadas en un substrato a distintas velocidades. (a) 500 [m/s], (b) 700 [m/s] y (c) 1000 [m/s] [34].

4.4.4. Aplicaciones de *Cold Spray*

Cold Spray no es implementado con la intención de reemplazar los procesos de manufactura tradicionales, sino que se busca que sea parte de un proceso completo de manufactura, que puede involucrar maquinado, tratamientos térmicos y químicos después de haber realizado *Cold Spray* [35].

Como se mencionó anteriormente, para resistir la corrosión y el desgaste de los álabes de turbinas a gas, se inyecta Inconel-718 para utilizarlo en la construcción de álabes [7]. Polvos de Al, Cu y Ni se utilizan como recubrimientos para generar resistencia a la corrosión, en el caso de recubrir aleaciones de magnesio altamente aplicadas en el ámbito aeroespacial [36]. Carburos de Tungsteno son depositables para formar elementos de alta resistencia al desgaste [37], a pesar de su baja deformación como partículas, se inyectan sobre un substrato dúctil. Además, *Cold Spray* es utilizado para reparar estructuras dañadas [37].

A través de Cold Spray, el níquel cuenta con aplicaciones ajenas a la construcción de turbinas a gas, por ejemplo, su conductividad eléctrica le permite ser utilizado como electrodo para el proceso de electrólisis, con el fin de obtener hidrógeno [38].

En el caso del titanio, sus usos van desde implantes médicos y dentales debido a sus buenas propiedades mecánicas, su baja densidad y por sobretodo, ser compatible con los tejidos del cuerpo humano [39]. Incluso, se han hecho pruebas de oxidación anódica sobre superficies rugosas de titanio, adquiridas a través de Cold Spray, con el argumento de que el óxido de titanio es un material bactericida [40].



Figura 4.16. Implante dental de titanio [38].

4.4.5. Modelamiento.

El modelamiento de altas deformaciones requiere de estudiar la deformación elástica, plástica y sin transferencia de calor entre partícula y substrato, si bien existe, la transferencia de calor se consideró despreciable con respecto a la tasa de trabajo por deformación.

Para modelar la deformación plástica de los materiales, se utiliza la ecuación constitutiva de Johnson-Cook mostrada en la Ecuación 4.7 [20].

$$\sigma(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, T) = [A + B(\varepsilon)^n] \left[1 + Cln\left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0}\right) \right] \left[1 - \left(\frac{T - T_0}{T_m - T_0}\right)^m \right]$$
(4.7)

Donde A, B, C, m y n son constantes dependientes del material utilizado. ε es la deformación, $\dot{\varepsilon}$ es la tasa de deformación y *T* es la temperatura del material. $\dot{\varepsilon}_0$ es una variable cuasi-estática para determinar las constantes A, B, C, m y n [11], T_m es la temperatura de fusión del material y T_0 es la temperatura ambiente. La energía por deformación se transforma en calor por conducción y calor para elevar la temperatura en la partícula [16], como lo muestra la Ecuación (4.8).

$$mc_p \partial T + Q_{cond} = \beta \sigma \partial \varepsilon \tag{4.8}$$

m es la masa de la partícula , β es la constante de Taylor-Quinney, usada para marcar la fracción de trabajo por deformación que se transforma en calor, y σ es el esfuerzo realizado. Q_{cond} es el calor por conducción.

En la zona de deformaciones elásticas, se considera válida la Ley de Hooke. Sin embargo, debido a las altas velocidades de impacto de las partículas, se producen ondas de choque, realizando variaciones de presión y densidad, para esto se utilizó una ecuación de estado, funcional en altas tasas de deformación (10⁶ a 10⁸ s⁻¹), capaz de relacionar la presión del impacto con la densidad de una zona localizada. Esta es la Ecuación de Mie-Grüniesen [14] descrita en la Ecuación (4.9).

$$p = \frac{\rho_0 c_0^2 \eta}{(1 - s\eta)^2} \left(1 - \frac{\Gamma_0 \eta}{2} \right) - \Gamma_0 \rho_0 E_m$$
(4.9)

$$\eta = 1 - \frac{\rho}{\rho_0} \tag{4.10}$$

$$\Gamma_0 = \Gamma(\rho_0) = \rho^{-1} \frac{\partial p}{\partial E}$$
(4.11)

Donde p es la presión, ρ es la densidad actual y ρ_0 es la densidad inicial, c_0 es la velocidad del sonido de un material específico, E_m es la energía por unidad de masa. s es la pendiente de Hugonot, proveniente de las ecuaciones de estado de Hugonot-Rankine en la condición de antes y después del impacto, es decir, cuando se produce la onda de choque [21].



Figura 4.17. Pendiente de Hugonot-Rankine [21].

4.4.6. Mallado ALE.

Con respecto al mallado adecuado para realizar el modelamiento, existen dos tipos de mallados, Lagrangiano y Euleriano. El mallado Euleriano toma un sistema de referencia fijo y el Lagrangiano toma un sistema de referencia con respecto al material medido, esto hace que, cuando se mueve el cuerpo, el sistema de referencia se toma con respecto al punto anterior. En el mallado Lagrangiano, las coordenadas nodales se mueven con el material, la malla se distorsiona. En cambio, en el mallado Euleriano, las coordenadas nodales y la malla se mantienen fijas y el material traspasa las fronteras de las mallas formadas por los nodos del mallado. Es común que el mallado Euleriano se utilice para la mecánica de sólidos y el mallado Lagrangiano se use para mecánica de fluidos [22].



Figura 4.18. Mallado Lagrangiano [23]



Figura 4.19. Mallado Euleriano [23].

Sin embargo, dado las altas deformaciones que se producen durante el impacto, al usar un mallado Euleriano, se producen distorsiones tan grandes en el mallado que lleva a que se invierta, alterando los nodos y las mediciones, uno de los problemas que tiene el uso de la Ecuación de Johnson-Cook es que depende de la calidad del mallado [5], por lo que el inconveniente anteriormente mencionado altera las mediciones [6]. Un mallado existente es el *Arbitrary Lagrangian Eulerian (ALE)*, que permite ser usado en modelos de mecánica de sólidos con altas deformaciones, debido a que los nodos de la malla se mueven, pero a menores magnitudes que el mallado Lagrangiano [39].



Figura 4.20. Esquema de Arbitrary Lagrangian Eulerian [41]. a) Mallado langrangiano, b) Mallado euleriano y c) Mallado Arbitrary Lagrangian-Eulerian. Dodo, A Punto de material, medio continuo del material y terpresenta la malla.

5. Metodología

Se realizaron simulaciones numéricas, utilizando el software *Abaqus/Explicit* [42], para análisis explícito, ya que genera mayores facilidades para la convergencia de datos y en tiempo de simulación que el análisis implícito, además, permitió la observación de resultados mientras se ejecutan las simulaciones.

5.1. Validación de Modelo.

Antes de analizar el comportamiento del níquel y del titanio, se realizaron pruebas, estudiando el comportamiento del cobre bajo diferentes métodos de mallado y control de distorsión que permite *Abaqus/Explicit* [42] con la intención de comprender cómo afectan estos métodos de control de distorsión a un modelo, consistente en el impacto de una partícula de cobre OFHC (Oxygen Free High Conductivity) de forma semi-circular de 10 [µm] de radio a una velocidad de 500 [m/s] sobre un sustrato 10 veces mayor que la partícula. Se asumió un modelo axisimétrico, es decir, el comportamiento visto en la mitad de la partícula, se asumió igual en la otra mitad. La partícula impactó sobre un substrato de cobre OFHC, las propiedades del cobre OFHC se muestran en la Tabla 5.1 [43].

Propiedad	Cobre
Flopledad	OFHC
Densidad ρ [kg/m ³]	8960
Módulo de Young E [GPA]	124
Calor específico c_p [J/kgk]	383
Conductividad k [W/mk]	386
A [MPa]	90
B [MPa]	292
С	0,025
n	0,31
m	1,09
T_m [K]	1478
$\dot{\varepsilon}_0 [\mathrm{s}^{-1}]$	1

Tabla 5.1: Parámetros iniciales para Cobre OFHC [43].

Las variables a estudiar en estas simulaciones fueron la temperatura, esfuerzo de Von Mises y la deformación escalar o PEEQ [42], buscando el elemento crítico (elemento de máxima temperatura). En la Tabla 5.2 se detalla el tipo de mallado los elementos de control utilizados y variables estudiadas.

Estructura de malla de partícula	Structured	
Estructura da malla da substrato	Structured en la región de impacto con la partícula	
Estituctura de mana de substrato	y el resto es <i>Free</i>	
Tamaño de elemento [µm]	0,4	
Forma de elemento	Cuadrangular	
Tipo de elemento	Coupled Displacement-Temperature	
Control de desplazamiento	ALE/Distortion Control (0,1;0,4 y 0,8)	
Conducción	Si/No	
Temperatura partícula y substrato antes del	298,15	
impacto [K]		
Variables a estudiar	Temperatura [K], deformación y esfuerzo de Von	
	Mises [MPa]	

Tabla 3.2. Comiguración utilizada para vandación.	Tabla 5.2.	Configu	ración	utilizada	para	validación
---	------------	---------	--------	-----------	------	------------

En la Figura 5.1, se muestra la configuración partícula-substrato utilizada y las condiciones de borde utilizadas durante el proceso de validación. El segmento de la partícula fue restringido a moverse en dirección vertical, al igual que la línea del substrato colineal al segmento de la partícula y la base del substrato tiene restricciones de movimiento traslacional.



Figura 5.1. Esquema de modelo de impacto utilizado por Li [43].

Los resultados se compararon con los resultados de Li [43], quién estudió el comportamiento de las herramientas integradas en *Abaqus/Explicit* para simular partículas de cobre OFHC.

5.2. Prueba de Sensibilidad de Malla

Para determinar la independencia del modelo, con respecto al tamaño de malla, se realizaron análisis con cuatro tamaños de elementos, especificados en la Tabla 5.3. Luego, se comparó la deformación promedio de la partícula en cada caso, ya que, según Assadi [14], la deformación, depende del tamaño de elemento; mientras más refinado es el mallado, mayor es la deformación máxima, por lo tanto, la temperatura de los elementos críticos, resulta mayor. En la Figura 5.2 se muestran los resultados de los estudios de Assadi sobre la máxima temperatura del elemento crítico de una partícula, con respecto al tamaño de elemento de malla [15].

Tabla 5.3. Tamaños de elementos utilizados en las pruebas de sensibilidad de malla.

Caso	Tamaño de elemento de malla [µm]
1	0,3
2	0.4
3	0.5
4	2



Figura 5.2. Elemento de máxima temperatura (elemento crítico) según el tamaño del elemento, para variadas velocidades de impacto [15].

5.3. Trabajo con Níquel y Titanio.

Se utilizó una partícula esférica, a diferencia de las simulaciones de cobre, donde se asumió axisimetría; en las simulaciones de níquel y titanio se estudió el ángulo de impacto, con lo cual, el uso de partículas semicirculares de tornó insuficiente. La partícula se encontraba en el momento justo

antes de impactar el substrato liso, en término específicos, la circunferencia era tangente a la superficie al inicio del impacto. No se consideraron efectos de la gravedad, la velocidad con que se mueve la tobera que inyecta las partículas, ni la existencia del gas, es decir, no se consideraron transferencias de calor por convección.

Para el trabajo con níquel y titanio, se realizó un estudio de deformación por impacto de partículas de níquel y titanio, con las propiedades de estos materiales mostrados en la Tabla 5.3 [44] [45].

Propiedad	Níquel	Titanio
Densidad ρ [kg/m ³]	8900	4510
Módulo de corte G [GPA]	79	43,3
Calor específico c_p [J/kgk]	456	528
Conductividad k [W/mk]	91	21,9
Velocidad del sonido c_0 [m/s]	5060	5020
Pendiente de Curva Hugonot-Carnot s	1,5	1,536
Coeficiente de Gruneisen Γ_0	2	1,07
A [MPa]	167	806,6
B [MPa]	648	481,6
С	0,006	0,0194
n	0,33	0,319
m	1,44	0,655
<i>T_m</i> [K]	1726	1923
$\dot{\varepsilon}_0$ [s ⁻¹]	1	1
μ[46]	0,53	0,38

Tabla 5.4. Parámetros iniciales para Níquel [44] y Titanio [45].

Se eligieron estos dos materiales, ya que el níquel es utilizado para revestimiento térmico de turbinas a gas (para combatir la corrosión) [7] y el titanio por ser utilizado en implantes médicos [39] (cabe destacar que son sólo algunos ejemplos de su utilidad). Estos materiales se estudiaron tanto como substrato como en forma de partículas, esto se detalla en la Tabla 5.4.

Tabla 5.5. Configuraciones de materiales de partícula y substrato.

Configuración de materiales	Partícula	Substrato
1	Níquel	Níquel
2	Titanio	Titanio
3	Níquel	Titanio
4	Titanio	Níquel

A continuación, se detallan las configuraciones de velocidad, temperatura y ángulo antes del impacto de la partícula al substrato en la Tabla 5.5, sumando 20 simulaciones realizadas por configuración de material, sumando un total de 40 simulaciones realizadas.

	Velocidad de impacto [m/s]	Temperatura de impacto [K]	Ángulo de impacto con respecto a la normal [grados]
	400		
Estudio de velocidad	500		
de impacto	600	298,15	0
uc impacto	700		
	800		
Estudio de		298,15	
temperatura de	600	600	0
impacto		900	
			0
Estudio de ángulo de	500	200.15	30
impacto	500	290,13	45
			60

Tabla 5.6. Configuraciones de velocidad, temperatura, ángulo de impacto de la partícula.

Con respecto a las dimensiones, la partícula tuvo un diámetro de 20 [μ m], mientras que el substrato se designó 10 veces más grande que el diámetro de la partícula utilizada, puesto que ha sido la proporción más utilizada en simulaciones de impacto de Cold Spray [15] [17] [43]. En el substrato, se definieron tres superficies para realizar distintos mallados; la superficie en contacto con la partícula se denominó S₁, la superficie que se encontraba entre la superficie en contacto con la partícula y la superficie exterior se denominó S₂ y la superficie externa se denominó S₃.



Figura 5.3. Configuración del modelo para simulaciones de níquel y titanio en Abaqus/Explicit.

Con respecto a las herramientas utilizadas por *Abaqus/Explicit*, estas se mencionan en la Tabla 5.7 y son detallados en la sección 9.1 de los Anexos.

Tipo de elemento	Dynamic-Temperature-displacement Explicit	
Tipo de análisis	Plane Strain	
Tipo de mallado	Cuadrangular	
Tamaño elemento de mallado de la partícula	A determinar según los resultados de las pruebas	
[µm]/formato de malla	de sensibilidad de mallado / Structured	
Tamaño elemento de mallado del substrato,	A determinar según los resultados de las pruebas	
superficie $S_1 [\mu m]$ /formato de malla	de sensibilidad de mallado / Structured	
Tamaño elemento de mallado del substrato,	0.7 / Errag	
superficie S ₂ [µm]/formato de malla	0,771722	
Tamaño elemento de mallado del substrato,	10 / Free	
superficie S ₃ [µm]/ formato de malla		
Modelo de contacto	Hard Contact y Contact pairs	
Modelo de fricción	Coulomb	
Mecanismo de adhesión	No	
Hourglass Control	Stiffness	
Arbitrary Lagrangian Eulerian (ALE)	Si	
Distortion Control	No	
Frequency	10	
Remeshing Sweeps per Increment	1	
Displacement Hourglass	50	
Lenght Ratio	0,1	

Tabla 5.7. Herramientas y configuraciones de Abaqus/Explicit utilizadas durante las simulacionesde impacto para níquel y titanio.

Con respecto al *Adaptative Meshing Controls*, se dieron las siguientes propiedades, mostradas en la Tabla 5.8. Estas propiedades se pueden encontrar detalladas en la subsección de Anexos 9.1, y también se encuentran detalladas en el manual de *Abaqus* [42].

Priority	Improve Aspect Ratio		
Smoothing Algorithm	Enhanced Algorith with evolving Geometry		
Meshing Predictor	Current Deformed Position		
Weight	1		
Initial Feature Angle	15°		
Advection	Second Order		
Momentum Advection	Half Index Shift		

Tabla 5.8. Propiedades del Adaptative Meshing Control [42].



Figura 5.4. a) Mallado structured de partícula, b) mallado de partícula y sustrato.

5.4. Métodos de Análisis

Se realizaron análisis de la temperatura, deformación y fuerza normal, puesto que son las variables normalmente estudiadas en simulaciones de impacto de Cold Spray [15] [17] [19]. Las variables anteriormente mencionadas, se estudiaron según la velocidad, temperatura previa al impacto y el ángulo de impacto.

Para analizar la presencia de *ASI* y la presencia de adhesión de partícula-substrato, se utilizaron 2 métodos distintos, descritos a continuación.

5.4.1. Método de Nikbakht.

Las variables de entrada se dieron con el objetivo para encontrar las temperaturas que se llegan durante el impacto, los esfuerzos, la presencia de jets y notar cual es la influencia de la *Adiabatic Shear Instability (ASI)*, esto último, analizando la presencia del punto de transición, como se puede ver en la Figura 4.5, donde se midió el salto de temperatura producido durante la deformación por el impacto de una partícula de Cobre [16]. Cabe mencionar que sólo se midió la presencia del Punto de Transición de forma visual, no se utilizó la Ecuación (4.1).

En caso de no poder encontrar el punto de transición, se buscó el caso en que la temperatura comenzara a elevarse, junto con el decrecimiento inmediato del esfuerzo de Von Mises, como el caso que se muestra en la Figura 4.6.

5.4.2. Método de Kurochkin y Wu.

Este método contempló el uso de las ecuaciones dentro de la investigación de Kurochkin [33] y Wu [34]. Se procedió a calcular el esfuerzo de adhesión relativo a%, utilizando la Ecuación (4.2), utilizando los parámetros de la Tabla 5.3, más la Ecuación (5.2) [47], para determinar el coeficiente de rigidez k entre átomos, para luego haber obtenido la frecuencia natural v entre los átomos del material estudiado, gracias a la Ecuación (5.3) [48] y la Ecuación (5.4) para calcular la cantidad de átomos en el plano de la red cristalina N_a [33].

Cabe mencionar que la interfase de adhesión entre níquel y titanio puede ser una microestructura heterogénea, por lo tanto, no se pueden conocer en profundidad sus propiedades, para este trabajo, se utilizaron propiedades del nitinol NiTi, las cuales son descritas en la Tabla 5.9.

	Níquel	Titanio	Níquel-Titanio
Energía de Activación E_a [kJ/kmol] [48] [49] [50]	254,98	141	215
Parámetro cristalino a [nm] [51] [52]	352,4	295,4	291
Módulo de Young <i>E</i> [MPa] [53] [54] [55]	220	100	85
Masa atómica <i>m</i> _a [mg] [56] [57]	58,71	47,88	-
Estructura cristalina [8] [34]	FCC	Hexagonal	BCC
Energía de sublimación <i>E</i> ₁ [kJ/kmol] [58] [59]	425	474	*

Tabla 5.9. Parámetros para las ecuaciones de Wu [34].

 $k = Ea \tag{5.2}$

$$v = \sqrt{\frac{2k(m_p + m_s)}{m_p m_s}} \tag{5.3}$$

$$N_a = \frac{n}{a^2 \sqrt{3}} \tag{5.4}$$

Donde m_p es la masa atómica de la partícula y m_p es la masa atómica del substrato. n es la cantidad de átomos dentro de la red cristalina (n = 2 (BCC), n = 4 (FCC), n = 6 (hexagonal)).

	Níquel	Titanio	Níquel-Titanio
Coeficiente de rigidez k [N/m]	77,53	29,51	24,74
Frecuencia natural v [Hz]	5,64*10 ¹³	3,85*10 ¹³	3,36*10 ¹³
Número de átomos en el plano cristalino <i>N_a</i>	1,86*10 ¹⁹	3,97*10 ¹⁹	1,36*10 ¹⁹

Tabla 5.10. Coeficiente de rigidez k y frecuencia natural v.

Ergo, se procedió a obtener la energía de adhesión A con la Ecuación (4.4) y la energía de rebote R con la Ecuación (4.6). Las variables de salida utilizadas en este método fueron la velocidad de rebote v_r , para calcular el coeficiente de restitución e_r con la Ecuación (4.3); el área y tiempo de contacto S_C y t_C respectivamente.

5.5. Adquisición de datos

Las variables de salida adquiridas fueron la temperatura, el esfuerzo de Von Mises, la fuerza normal y la deformación PEEQ. A excepción de la fuerza normal, las demás variables fueron extraídas de un total de 16 elementos de la partícula, donde se dieron las mayores temperaturas. El color blanco denota mayor temperatura, mientras que el negro denota menores temperaturas.

Se eligieron 2 grupos de elementos por lado de la partícula (derecha e izquierda), cada grupo tomó 2 filas de 4 elementos, como se ilustra en la Figura 5.5, donde se presentan los elementos elegidos en cuadros delineados en rojo. Y para evitar irregularidades en algún elemento, se tomó el promedio decada elemento. En caso de estudio de ángulo de impacto, sólo se tomaron 16 elementos en dos filas del lado de impacto (izquierdo) como se muestra en la Figura 5.6.



Figura 5.5. Elementos estudiados, en caso de temperatura, esfuerzo de Von Mises, deformación PEEQ y volumen durante el tiempo.



Figura 5.6. Elementos analizados en impactos angulares.

Sin embargo, la deformación *PEEQ* presentaba problemas al momento de ser calculada, mostrando un decrecimiento después del aumento, debido al remallado del *ALE*, que suaviza la deformación *PEEQ*. Para evaluar más certeramente, se ponderó el promedio de la deformación con el promedio del volumen del mismo grupo de elementos, con respecto al promedio del volumen total de la partícula V_T .

$$\varepsilon = \frac{V}{V_T} P E E Q \tag{5.5}$$

Para calcular la fuerza normal F_N , se tomó el promedio de los nodos de la partícula que se encontraban en contacto con el substrato. Y para la energía elástica, se tomó el promedio de la energía elástica por volumen e_e de todos los elementos de la partícula, multiplicado por el promedio del volumen de todos los elementos de la partícula V_T .



Figura 5.7. Nodos de la partícula en contacto con el substrato para calcular la fuerza normal F_N .

5.5.1. Método de Nikbakht.

Como se mencionó anteriormente, se seleccionaron 8 elementos por lado para poder extraer la temperatura y el esfuerzo de Von Mises. En el caso de estudio de impactos angulares, se extrajeron 16 nodos del lado izquierdo, donde se obtuvieron las mayores temperaturas.

5.5.2. Método de Kurochkin y Wu.

Las variables de salida fueron la velocidad de salida v_r , adquirida con el promedio de las velocidades de los elementos de todas las partículas para calcular el coeficiente de restitución e_r con la Ecuación (4.8); el área máxima de contacto S_c (obtenida a través de inspección visual) y el tiempo de contacto t_c (obtenido a través de inspección visual) y el tiempo de contacto t

6. Resultados, Análisis y Discusiones.

Primero se presentan los resultados obtenidos de la validación del modelo inicial, para luego seguir con las pruebas de sensibilidad de malla, determinando el tamaño de elemento a utilizar en las simulaciones de níquel y titanio.

Ergo, se muestran los resultados de las pruebas de níquel y titanio, distinguidos según la Tabla 5.5 y mostrados el siguiente formato.

- Estudios de velocidad
- Estudios de temperatura.
- Estudios de ángulos de inclinación.
ME 6909-1 TRABAJO DE TÍTULO

Dentro de cada uno de estos formatos, se subdividieron en estudios de deformación, temperatura y fuerza normal con respecto al tiempo de impacto, medidos en los elementos de mayor temperatura, como los vistos en la Figura 5.5 y 5.6.

Finalmente, se realizaron los análisis de los métodos de Nikbakht y Kurochkin/Wu para investigar la presencia de adhesión de partículas.

6.1. Validación de Modelo.

Li [26] experimentó el efecto que tenía en las simulaciones la presencia de la conductividad térmica del cobre. Sin conductividad térmica, logró llegar a temperaturas aproximadas de 1033 [K], en el caso del presente trabajo, se llegó a 1080 [K], obteniendo un error de 4,35 [%]. Pero al tener conducción, la temperatura máxima fue aproximadamente de 463 [K] y en el caso del presente trabajo 470 [K], con un error de 1,5 [%], debido a la distribución de calor alrededor de la pieza. Al haber menores temperaturas, se necesitan mayores esfuerzos para deformar la partícula. Resultados similares se obtuvieron en el actual estudio, mostrados en la Figura 6.2, La Figura 6.4 muestran los resultados de las investigaciones de Li [43].



Figura 6.1. Resultado de estudio actual de impacto con cobre a) sin conducción y b) con conducción.



Figura 6.2. Resultados del estudio actual a) sin conducción térmica y b) con conducción térmica.



Figura 6.3. Simulaciones de impacto de Cobre sin conducción térmica (a y c) y con conducción térmica (b y d), con las mediciones de deformación (a y b) y temperatura en cada elemento (c y d) [42].



Figura 6.4. Gráficos de esfuerzo de Von Mises (S), temperatura (T) y deformación (PEEQ) [43] sin conducción (a) y conducción térmica (b).

Siguiendo con el estudio de la conducción térmica, se pudo notar que en los casos en que no existe conducción, la *ASI* es más visible en los resultados de la Figura 6.4. En cambio, la *ASI* se observó suavizada en el caso que tomó en cuenta la conducción térmica. Además, la presencia de conducción permitió liberar parte de la temperatura desde la zona de la *ASI* hacia el resto de la partícula y substrato, reduciendo la máxima temperatura del elemento crítico.

Luego se comparó el efecto del *Lenght Ratio* (definido como un factor escalar para aliviar el exceso de deformación [42]) con los mismos valores utilizados por Li [43]; 0.1, 0.4 y 0.8. A mayor *Lenght Ratio*, existe mayor restricción para la deformación, por lo que las temperaturas alcanzadas por el elemento crítico son menores. La Figura 6.4 muestra el resultado con un *Lenght Ratio* de 0,1, mientras que la Figura 6.5 muestra los resultados con 0,4. Con un *Lenght Ratio* de 0,4 no mostró menor temperatura, pero si menor deformación (300 [%]). Como *Lenght Ratio* es una herramienta de *Abaqus/Explicit* para disminuir la deformación artificialmente, se prefirió utilizar el mínimo *Lenght Ratio* de 0,1.



Figura 6.5. Gráfico de temperatura (TEMP), esfuerzo de Von Mises (STRESS) y deformación (PEEQ) con Lenght Ratio de 0,4.

6.2. Sensibilidad de Mallado.

Como se mencionó anteriormente, el tamaño de los elementos de la malla afectan la máxima temperatura alcanzada por el elemento crítico, sin embargo, las simulaciones realizadas con distintos tamaños no afectan la deformación promedio de la partícula si se utiliza tamaños de elementos parecidos. En este caso, los tamaños de 0.3, 0.4 y 0.5 no cuentan con grandes cambios en la deformación. Comparando el tamaño de elemento 0,3 [μ m] con 0,4 [μ m] se encontró un porcentaje de error de 2,5 [%], mientras que, entre 0,4 [μ m] y 0,5 [μ m], se obtuvo un error de 1,3 [%]. Sin embargo, cuando se utilizó tamaños de 2 [μ m], la deformación promedio tuvo un error de 5,1 [%] con respecto a los 0,4 [μ m]. Dado lo anterior, el tamaño necesario para no generar grandes cambios en el modelo ronda entre los 0,3 a los 0,5 [μ m].

Para este trabajo, las siguientes simulaciones se realizaron con un tamaño de elemento de 0,4 [μ m], ya que tomó menor tiempo computacional que 0,3 [μ m], este último le tomaba el doble de tiempo para llegar al resultado final.



Figura 6.6. Deformación (Strain) vs Tiempo [s] con distintos tamaños de elementos.

6.3. Trabajo en Níquel y Titanio.

6.3.1. Resultados de Simulaciones según Velocidad de Impacto.

Se han realizado 20 simulaciones, teniendo en cuenta la velocidad de partícula como parámetro de estudio. Independiente de los materiales utilizados, la deformación ε aumentó, mientras aumentaba la velocidad de contacto, por consiguiente, también aumentó la temperatura máxima durante el impacto.

En las figuras 6.7, 6.8 y 6.9 se pueden ver comparaciones de simulaciones numéricas realizadas en este trabajo, comparadas con resultados experimentales de otros investigadores [19] [32] [61] con la intención de mostrar los gradientes de temperatura y comparar la geometría de las partículas obtenidas por simulaciones y los casos experimentales. El resto de las simulaciones de impactos se pueden visualizar en la sección 9. Anexos.

Los resultados de simulaciones se muestran según gradientes de temperatura, mostrando que las máximas temperaturas se lograron en el límite entre la partícula y el substrato, específicamente en la periferia de la partícula, producto de la alta deformación en estas zonas, zonas potenciales para *ASI* [19]. Según Nikbakth [19], la periferia de la partícula, constituye a la zona de mayor deformación, visto gracias a tratamientos químicos después de realizar Cold Spray, mostrando que al separar la partícula del substrato, las zonas más rugosas, y por lo tanto, de mayor presencia de adhesión, fue en la periferia de la partícula, donde hubo mayor deformación de la partícula.



Figura 6.7. Impacto de partícula de níquel. Simulación de impacto de níquel sobre níquel (izquierda) y fotografía de estudio experimental de níquel sobre cobre [32]



Figura 6.8. Comparación impacto de titanio sobre titanio. a) Simulación actual a 700 [m/s] y b) fotografía de proceso experimental a 724 [m/s] [61].



Figura 6.9. Comparación de impacto de níquel sobre titanio. a) Simulación actual y b) fotografía experimental [19].

Como se ilustra en la Figura 6.10, se lograron mayores deformaciones en el caso de níquel sobre níquel, con 660 [%] de deformación máxima, mientras que el caso de titanio sobre titanio obtuvo las menores deformaciones, con 350 [%] de deformación, producto que el níquel es un material más dúctil que el titanio, permitiendo mayor deformación. Además, el níquel tiene una densidad de 8890 [kg/m³] y el titanio de 4510 [kg/m³], mostrando que el níquel es aproximadamente el doble de denso que el titanio, significando que la partícula de níquel tiene el doble de masa que la de titanio, por consiguiente, el doble de energía cinética, por lo tanto, mayor energía cinética que se puede transformar en energía de deformación.

En los casos de materiales mixtos, las deformaciones fueron de 490 [%] de deformación para níquel/titanio y 470 [%] de deformación para titanio/níquel.

Una variable importante dentro de la deformación es la densidad de los materiales [39], ya que determina la energía cinética con la que llega la partícula a impactar. Esta variable explica el hecho de que se presenciara mayor deformación en la partícula de titanio sobre níquel, que la misma partícula de titanio sobre titanio, cabe destacar que se estudió la deformación de localidad de la partícula de mayor temperatura en vez de la partícula completa, ver Figura 5.5 y 5.6 como referencia. En el caso de níquel usado como como partícula, las deformaciones fueron más altas que las que involucraron a titanio como partícula, sin importar el material del substrato.



Figura 6.10. Deformación ε con respecto al tiempo t [ηs], según distintas velocidades. a) Níquel sobre níquel, b) Titanio sobre titanio, c) Níquel sobre titanio, d) Titanio sobre níquel.

Anteriormente, se mencionó que la temperatura durante el impacto aumentaba con la velocidad previa al impacto, lo cual se aprecia en la Figura 6.11. No obstante, a diferencia de la deformación, la temperatura máxima, resultó ser mayor en los casos de titanio como partícula (1130 [K] para los casos de titanio sobre titanio y 1320 [K] para titanio sobre níquel) que níquel como partícula (840 [K] y 760 [K] para níquel sobre níquel y níquel sobre titanio, respectivamente).

Lo anterior se pudo deber al hecho de la conductividad térmica del titanio es aproximadamente 4,5 veces menor que el níquel, por ende, el titanio retuvo mayor cantidad de temperatura, producto del trabajo por deformación, mientras se perdía menos temperatura por conducción. Otro factor importante, fue la densidad de los materiales, puesto que a mayor masa, mayor es la capacidad

calorífica, menor es el alza de temperatura. El níquel utilizado contó con el doble de densidad que el titanio utilizado. Además, como la deformación fue mayor para titanio en níquel que titanio en titanio, por consecuencia, la temperatura también fue mayor.



Figura 6.11. Temperatura T [K] con respecto al tiempo t [ηs], según distintas velocidades. a) Níquel sobre níquel, b) Titanio sobre titanio, c) Níquel sobre titanio, d) Titanio sobre níquel.

Los resultados de cálculos de la fuerza normal sobre la partícula, mostrados en la Figura 6.12, muestran que a mayor velocidad de impacto, mayor fue la fuerza normal de contacto. A excepción de las simulaciones de titanio sobre titanio, hubo un punto mínimo local durante el impacto cercano al comienzo del impacto, después volvió a aumentar la fuerza normal, producto de la expansión y formación de *jets* de la partícula, cubriendo mayor superficie.

Las simulaciones de níquel sobre níquel obtuvieron mayores fuerzas normales que las demás simulaciones con aproximadamente 2 [N] de fuerza. Esto se debe a que el níquel utilizado, tiene el doble de densidad que el titanio, por lo que contó con mayor momentum durante el impacto, aumentando la fuerza del impacto.



Figura 6.12. Fuerza Normal F_N [N] con respecto al tiempo t [η s], según distintas velocidades. a) Níquel sobre níquel, b) Titanio sobre titanio, c) Níquel sobre titanio, d) Titanio sobre níquel.

6.3.2. Resultados de Simulaciones según Temperatura de Impacto.

Se realizaron simulaciones, estudiando el comportamiento de las partículas, cuando impactaron a temperaturas que variaron desde la temperatura ambiente (298 [K]), 600 [K] y 900 [K]. En términos de forma geométrica, las simulaciones de níquel sobre níquel, no presentaron grandes diferencias, como se muestra en la Figura 6.13. En cambio, a mayor temperatura, fue más notoria la diferencia geométrica para las partículas de titanio. A mayor temperatura, las partículas de titanio fueron más achatadas y con *jets* más pronunciados, como se puede ver en la Figura 6.14. Lo anterior se encuentra cuantificado en los gráficos de la Figura 6.15, donde la diferencia de deformación máxima para níquel sobre níquel de 298 [K] a 900 [K] fue de 66 [%], para níquel sobre titanio fue de 129 [%], mientras que para titanio sobre titanio fue de 293 [%] y para titanio sobre níquel fue de 193 [%].



Figura 6.13. a) Simulaciones de níquel en níquel a 298 [K] y b) a 900 [K] de temperatura como parámetro de entrada.



Figura 6.14. a) Simulaciones de titanio en titanio a 298 [K] y b) a 900 [K] de temperatura como parámetro de entrada.



Figura 6.15. Deformación ε con respecto al tiempo t [ηs], según distintas temperaturas previas al contacto. a) Níquel sobre níquel, b) Titanio sobre titanio, c) Níquel sobre titanio, d) Titanio sobre níquel.

Con respecto a las temperaturas durante el tiempo de impacto, los gradientes de temperatura se comportaron de manera similar, como se muestra en la Figura 6.16, donde se muestra la temperatura durante el tiempo de impacto. Cabe mencionar que no se presenciaron temperaturas mayores a las temperaturas de fusión del níquel (1726 [K]), ni el titanio (1923 [K]), por lo tanto, no hubo fusión de material.



Figura 6.16. Temperatura T [K] con respecto al tiempo t [ŋs], según distintas temperaturas previas al impacto. a) Níquel sobre níquel, b) Titanio sobre titanio, c) Níquel sobre titanio, d) Titanio sobre níquel.

En cuanto a la fuerza normal, no se presenció una tendencia que diga si la temperatura antes del impacto afectó a la fuerza normal de impacto. Como se puede ver en la Figura 6.17, no hubieron cambios en la fuerza normal a la que la partícula fue sometida, esto puede deberse a que no se consideraron el calor específico, conducción ni módulo de corte como variables dependientes de la temperatura de la partícula, pues, los parámetros anteriormente mencionados, van cambiando con respecto a la temperatura a la que son sometidos, pudiendo cambiar los resultados obtenidos.

El módulo de corte afecta la deformación elástica y por lo tanto, el esfuerzo sometido. La conductividad térmica y el calor específico afectan la temperatura del material, pudiendo también, alterar la deformación y esfuerzos sometidos dentro de la partícula.



Figura 6.17. Temperatura T [K] con respecto al tiempo t [ŋs], según distintas temperaturas previas al impacto. a) Níquel sobre níquel, b) Titanio sobre titanio, c) Níquel sobre titanio, d) Titanio sobre níquel.

ME 6909-1 TRABAJO DE TÍTULO

6.3.3. Resultados de Simulaciones según Ángulo de Impacto.

Se realizaron simulaciones con ángulos de impacto de 30, 45 y 60°, realizándose comparaciones con casos experimentales. Como se pudo apreciar en la Figura 6.18, a pesar de que son estudios con distintos materiales, ambas partículas muestran comportamiento geométrico similar, formando un espacio, que en inglés se le denomina *gap* [62], esto se debe a la energía cinética restante de la partícula, separando la parte posterior de la partícula del substrato.



Figura 6.18. Comparación de impacto en ángulo de 30° con respecto a la normal. a) Simulación actual de níquel en titanio y b) fotografía experimental de aluminio 6061 [62].



Figura 6.19. Comparación de impacto en ángulo de 45° con respecto a la normal. a) Simulación actual de níquel en níquel y b) fotografía experimental de aluminio 6061 [62].

Mientras mayor ángulo de impacto con respecto a la normal, el deslizamiento de la partícula es mayor, generando un cráter más largo, por tener mayor momentum en la dirección horizontal. Al estudiar la deformación de la partícula, se percató que al realizar impactos de 30° con respecto a la normal, alcanzó deformaciones máximas mayores que los impactos perpendiculares, como se ilustra en la Figura 6.20.

Una posible causa de este fenómeno, puede ser que la mayor concentración de esfuerzos en esta zona, incrementando la deformación, y a la vez, aumentando la temperatura de la superficie en contacto.



Figura 6.20. Deformación ε con respecto al tiempo t [ηs], según distintos ángulos de contacto, mostrados en la leyenda e). a) Níquel sobre níquel, b) Titanio sobre titanio, c) Níquel sobre titanio, d) Titanio sobre níquel.

Al obtener mayor deformación en los impactos de 30° , que los impactos de 0° , se obtuvo mayor temperatura que los impactos a 0° . Otro efecto visto y que no se ha estudiado en otros trabajos, es el efecto del deslizamiento por roce en la temperatura de las partículas, logrando en la mayoría de los casos (menos los de titanio sobre níquel) que las temperaturas de las partículas de níquel fueran mayores a los 45 y 60° de impacto. Lo anterior se puede visualizar en la Figura 6.21. La excepción puede deberse a que la partícula de titanio rodó sobre el substrato de níquel, sin producir deslizamiento.



Figura 6.21. Temperatura T [K] con respecto al tiempo t [ŋs], según distintos ángulos de contacto, mostrados en la leyenda e). a) Níquel sobre níquel, b) Titanio sobre titanio, c) Níquel sobre titanio, d) Titanio sobre níquel.

Los resultados mostrados en la Figura 6.22 no mostraron tendencias que indiquen a qué ángulo la partícula fue sometida a mayor fuerza normal.



Figura 6.22. Fuerza Normal F_N [N] con respecto al tiempo t [η s], según distintos ángulos de contacto. a) Níquel sobre níquel, b) Titanio sobre titanio, c) Níquel sobre titanio, d) Titanio sobre níquel.

Como se mencionó anteriormente, *Abaqus/Explicit* no tiene la capacidad de generar mecanismos de adhesión, a menos que el usuario configure la opción de no separación del programa [42]. Se realizaron simulaciones con 30 y 45 grados con respecto a la normal y con una condición adicional; se privó a la partícula poder separarse del substrato desde los 20 [η s] y otros ejemplos a los 50 [η s], para notar la forma que adquirió la partícula y compararla geométricamente con los casos de separación de la partícula.

Las simulaciones a 30°, vistas en las Figuras 6.23 y 6.25 no muestran grandes diferencias de geometría ni grandes distorsiones por la adhesión de la partícula. No obstante, a 45°, se visualizan diferencias geométricas, producto de la mayor energía de restitución, llevando a las partículas a tomar formas poco convencionales, como en las figuras 6.24 y 6.26. Estas simulaciones pueden ratificar el hecho de que a más de 30° de inclinación, la adhesión de partículas sea despreciable [63].



Figura 6.23. Simulación níquel sobre níquel a 30°. a) 25 [ŋs] con separación y b) 200 [ŋs] sin separación.



Figura 6.24. Simulación níquel sobre níquel a 45°. a) 50 [ŋs] con separación y b) 200 [ŋs] sin separación



Figura 6.25. Simulación titanio sobre titanio a 30°. a) 20 [ηs] con separación y b) 200 [ηs] sin separación.



Figura 6.26. Simulación titanio sobre titanio a 45°. a) 20 [ŋs] con separación y b) 200 [ŋs] sin separación.

6.3.4. Análisis de Método de Nikbakht.

Se realizaron estudios de temperatura y esfuerzo de Von Mises con respecto al tiempo de impacto a las 40 simulaciones efectuadas, buscando una relación que permitiera visualizar la presencia de *ASI*. Según Nikbakht [41], la temperatura de la partícula comenzaría a elevarse, desde que comienza a disminuir el esfuerzo sometido por el contacto entre la partícula y el substrato. Esto sucedió para las simulaciones de partículas de titanio en substrato de níquel, simulaciones que tuvieron las máximas temperaturas. Como ejemplo, se puede ver en la Figura 6.20. Para ver más casos, dirigirse a la subsección de Anexos 9.6.



Figura 6.27. Comparación Temperatura T [K] y esfuerzo de Von Mises S [MPa] para el caso de titanio sobre níquel a 800 [m/s] de velocidad de impacto. La línea vertical indica el momento en que la velocidad fue la mínima, durante el impacto.

Otro modo de analizar la presencia de *ASI*, fue buscando la *Thermal Boost-Up Zone (TBZ) [17]*, presenciado en las simulaciones de níquel sobre titanio, no obstante, el efecto disminuye al aumentar las velocidades, posiblemente porque la deformación se tradujo en alza de temperatura antes de poder

formar la *TBZ*. Como ejemplo, se muestra la Figura 6.28, donde la *Thermal Boost Up Zone (TBZ)* ocurrió desde los 20 [ŋs].



Figura 6.28. Comparación de Temperatura T [K] y esfuerzo de Von Mises S [MPa] en 50 [ŋs], en simulación de níquel sobre titanio, mostrando la TBZ desde los 20 [ŋs]. La línea vertical indica el momento en que la velocidad fue la mínima durante el impacto.

Sin embargo, en todas las simulaciones se observó que el alza de temperatura desde la temperatura inicial, se produjo durante una segunda alza de esfuerzo de Von Mises. Esto se puede deber a que el alza de temperatura es proporcional al esfuerzo sometido, como fue mostrado en la Ecuación 4.3. Lo anterior se muestra en la Figura 6.29 con el tiempo en que la temperatura aumenta (2,71 [ŋs]), justo cuando comienza por incrementar por segunda vez el esfuerzo de Von Mises.



Figura 6.29. Comparación de Temperatura T [K] y esfuerzo de Von Mises S [MPa] en 10 [ŋs], mostrando el tiempo en que se dio el segundo incremento de esfuerzo (mostrado en la línea vertical), mientras ocurrió alza de temperatura.

ME 6909-1 TRABAJO DE TÍTULO

A pesar de haber identificado la presencia de *ASI* en las simulaciones, mediante la *TBZ*, el decrecimiento de esfuerzo y simultánea alza de temperatura, no se encontró algún indicio que relacione la presencia de *ASI* con la adhesión de la partícula. Puesto que ASI se pudo encontrar en las simulaciones independientemente de las velocidades, temperaturas y ángulos de impacto. Lo buscado, fue que la temperatura diera un segundo incremento desde una cierta velocidad de impacto, o que la temperatura aumente justo cuando disminuya el esfuerzo de Von Mises desde una cierta velocidad de impacto, la cual pudo ser denominada velocidad crítica.

Assadi [14], postuló que *ASI* era un criterio para determinar la velocidad crítica de distintos materiales en *Cold Spray*. Sin embargo, Hassani-Ganjaraj [24] afirmó que *ASI* no es un mecanismo necesario para que se produzca adhesión.

6.3.5. Análisis de Método Kurochkin y Wu.

Este análisis, comenzó con el cálculo de los coeficientes de restitución para cada impacto, mostrados en la Figura 6.30. Las grandes diferencias de valores se notaron según el substrato usado, debido a que esta parte fue lo suficientemente grande para absorber la energía de la partícula. Los substratos de níquel generaron menores coeficientes de restitución (entre 2 a 4 [%]) por tener mayor ductilidad que el titanio (entre 6 a 14 [%]).

Para los casos de níquel en níquel y titanio sobre titanio, el coeficiente de restitución disminuyó con respecto a la velocidad, como era esperado según la literatura [30]. Todo lo contrario ocurrió para los casos mixtos, donde el coeficiente de restitución aumentó con respecto a la velocidad.

Analizando distintas temperaturas, a mayor temperatura, mayor es la ductilidad de los materiales, esto logró ablandar la partícula, para obtener mayor energía de deformación plástica que elástica, esto puede ser visto en la Figura 6.30. Si bien la partícula se vuelve más dúctil a mayores temperaturas, no se manejó el substrato a distintas temperaturas, por lo tanto no aumentó su ductilidad, lo cual, podría haber disminuido el coeficiente de restitución.

Durante el análisis de impactos con distintos ángulos, se da el hecho de que a mayor ángulo, mayor fue el coeficiente de restitución, superando el valor de 60 [%], esto se debe a que parte del momentum de la partícula, iba en dirección horizontal, y por consiguiente, la velocidad en el eje horizontal era mayor al aumentar el ángulo.



Figura 6.30. Coeficiente de restitución de distintos impactos de partícula/substrato, según a) velocidades, b) temperatura y c) ángulos.

Se observó la máxima área de contacto S_c en las simulaciones, esta aumentó con el incremento de velocidad por el mayor trabajo de deformación. A distintas temperaturas, la diferencia entre las simulaciones a 298 [K] y las simulaciones de 900 [K] fueron menores a 2500 [μ m²], debido a que si bien la partícula es más dúctil, el substrato sigue a temperatura ambiente, disminuyendo las variaciones en el cráter que forma el substrato. El área de contacto S_c disminuyó con un mayor ángulo de depositación, consecuente según la literatura [33].

En cuanto a los materiales utilizados, las simulaciones de níquel consiguieron obtener mayor área por ser más dúctil que el titanio, entre 5000 $[\mu m^2]$ y 22500 $[\mu m^2]$ para níquel y entre 2000 y 7500 $[\mu m^2]$ para titanio. Y las simulaciones de níquel sobre níquel alcanzaron mayores áreas de contacto las simulaciones de níquel sobre titanio, con áreas de de 23500 y 11000 $[\mu m^2]$ respectivamente. Lo anterior se debe porque las simulaciones de níquel sobre níquel sobre níquel generaron mayor profundidad que las simulaciones de níquel sobre titanio.



Figura 6.31. Área de contacto de distintos impactos de partícula/substrato, según a) velocidades, b) temperatura y c) ángulos.

El tiempo de contacto t_c fue mayor para las simulaciones de níquel sobre níquel, obteniendo un máximo de 65 [η s], por ser el material más dúctil, mientras que las simulaciones de titanio sobre titanio obtuvieron los menores tiempos de contacto por su menor ductilidad, máximo 25 [η s].

Con respecto a las velocidades, a mayor velocidad, mayor fue el tiempo de contacto, pero no se notaron grandes cambios con distintas temperaturas, a excepción de los impactos de titanio con titanio, los cuales podían tener diferencias sobre los 10 [η s], puede que haya aumentado la ductilidad a mayor temperatura. Con respecto a los distintos ángulos, los tiempos de contacto aumentaron desde los 0 a los 45° de impacto, puesto que parte del momentum se disipó en orientación horizontal.



Figura 6.32. Tiempo de contacto de distintos impactos de partícula/substrato, según a) velocidades, b) temperatura y c) ángulos.

Utilizando la Ecuación 4.2, se calculó el porcentaje de adhesión, o también llamado esfuerzo de adhesión relativo a%, y los resultados son ilustrados en la Figura 6.33. La Figura 6.33 a) mostró que la velocidad de impacto incrementó el porcentaje de adhesión a%, específicamente, se produjo salto en el porcentaje de adhesión a% desde los 500 [m/s] para titanio en titanio, 600 [m/s] para níquel sobre níquel y níquel sobre titanio, y entre 600 y 700 para titanio sobre níquel. Como se mostró en la Figura 6.29 b) la temperatura también aumenta el porcentaje de adhesión a%, sin embargo, a mayor ángulo de impacto, el porcentaje de adhesión disminuye, puesto que aumenta considerablemente el coeficiente de restitución.

En cuanto a las diferencias de combinaciones de materiales, la combinación titanio en titanio ocurre adhesión a velocidades menores que las demás combinaciones, debido a su mayor frecuencia natural v y su menor energía de activación E_a (141 [kJ/mol]), mientras que el níquel y el conjunto níqueltitanio tenían las mayores energías de activación E_a (234,98 y 215 [kJ/mol], respectivamente).



Figura 6.33. Porcentaje de adhesión a% de distintos impactos de partícula/substrato, según a) velocidades, b) temperatura y c) ángulos.

Finalmente, con el área y tiempo de contacto S_C y t_C , respectivamente, el coeficiente de restitución e_c y el porcentaje de adhesión a%, se pudo calcular la energía de adhesión A y la energía de rebote R con las ecuaciones 4.4 y 4.6 respectivamente.

Si se considerara que la energía de adhesión *A* fuera mayor que la energía de rebote *R*, estaríamos en presencia de una velocidad de adhesión o crítica [33]. Según la Figura 6.34, las simulaciones de níquel sobre níquel, alcanzaron mayor energía de adhesión *A* que energía de rebote *R* entre los 500 y 600 [m/s]. Las simulaciones de titanio sobre titanio lograron energía de adhesión entre los 500 y 600 [m/s], y en los casos de simulaciones de materiales mixtos, las energías de adhesión están entre los 600 y 700 [m/s].



Figura 6.34. Energía de adhesión A (rojo) y energía de rebote R (azul) según distintas velocidades de impacto. a) Níquel sobre níquel, b) Titanio sobre titanio, c) Níquel sobre titanio y d) Titanio sobre níquel.

En la Tabla 6.1 se comparan las velocidades críticas obtenidas en este trabajo con otras simulaciones y resultados experimentales [15] [28] [29].

Partícula/Substrato	Assadi [15]	Grujicic [28]	Experimental [28]	Resultados del trabajo actual
Ni/Ni	600-610	620-630	610-680	551
Ti/Ti	670-680	650-670	700-890	520
Ni/Ti	-	-	-	673
Ti/Ni	-	-	-	607

Tabla 6.1. Velocidades críticas de níquel y titanio.

ME 6909-1 TRABAJO DE TÍTULO

En cuanto a pruebas con distintas velocidades, las simulaciones de níquel sobre níquel, se adhirieron a valores (551 [m/s]) un más bajos que los resultados de simulaciones de Assadi [15] o Grujicic [28]. Los resultados de titanio sobre titanio resultaron más bajos (velocidad crítica entre 520 [m/s]) que los de la literatura [15] [28] [29], sin embargo, cabe destacar que los métodos de obtención de velocidad crítica previamente originados por Assadi [15] y Grujicic [28] se basaron en la aparición de *ASI*, en un medio sin conducción térmica, y el otro método utilizado por Assadi [29], es un método estocástico, dependiente del impacto de varias partículas. La Figura 6.35 b), muestra cómo se puede dar la adhesión de partículas de titanio en titanio a menores velocidades que la literatura [15] [28] [29]. La Figura 6.35 comparó geométricamente las formas de las partículas de Titanio después del contacto.



Figura 6.35. Comparación de impactos titanio sobre titanio a 500 [m/s]; a) simulación con su gradiente de temperatura y b) fotografía de experimento.

En los casos de distintas temperaturas a 600 [m/s], las mayores temperaturas ayudaron a aumentar la adhesión, por el menor coeficiente de restitución y por mayor área de contacto con mayor temperatura.



Figura 6.36. Energía de adhesión A (rojo) y energía de rebote R (azul) según distintas temperaturas de impacto. a) Níquel sobre níquel, b) Titanio sobre titanio, c) Níquel sobre titanio y d) Titanio sobre níquel.

Por último, en las simulaciones con cambio de ángulo de impacto, al haber impactado con mayor ángulo con respecto a la normal, terminaron con mayor energía de rebote R, por un mayor coeficiente de restitución y menor velocidad vertical, por lo tanto, las partículas no lograron adherirse.



Figura 6.37. Energía de adhesión A (rojo) y energía de rebote R (azul) según distintos ángulos de impacto con respecto a la normal. a) Níquel sobre níquel, b) Titanio sobre titanio, c) Níquel sobre titanio y d) Titanio sobre níquel.

Al conocer que la deformación y temperatura máxima resultó mayor a ángulos de impacto de 30° que 0° , resulta interesante la idea de estudiar impactos con ángulos de inclinación entre 0 a 30° , si bien a mayor ángulo de inclinación, disminuyó la adhesión, fuerzas de roce pueden generar mayores temperaturas, propiciando la adhesión de la partícula.

7. Conclusiones.

A través de simulaciones numéricas, se estudió el comportamiento de partículas y substratos de níquel y titanio, según parámetros, como la velocidad, temperatura y ángulo de impacto, buscando como influyeron a la deformación, temperatura de salida, esfuerzos y fuerzas.

A mayores velocidades de impacto, aumentó la deformación, temperatura y fuerza normal dentro del impacto, se observa el mismo efecto a distintas temperaturas, esto se debe a la mayor ductilidad a mayores temperaturas.

En cambio, a mayor ángulo de inclinación, sólo los casos de 30° de inclinación, la deformación resulta mayor. Las temperaturas aumentaron al aumentar el ángulo de inclinación, producto de mayor presencia de deslizamiento.

Se estudiaron 2 métodos para determinar la adhesión de partículas. El método de Nikbakth, sólo pudo determinar la presencia de *ASI* en la partícula, y como se ha mencionado en la sección de Resultados, no implicó la presencia de adhesión. No obstante, se encontró que la temperatura de la partícula comenzó a aumentar en el instante en que esta sufrió decrecimiento y crecimiento instantáneo de la tasa de esfuerzo.

El método de Kuroschkin y Wu si pudo identificar velocidades de adhesión, con titanio sobre titanio y níquel sobre níquel con 551 [m/s] para la velocidad crítica (más bajo que la literatura [15] [28] [29]); con 520 para simulaciones con materiales mixtos, sin embargo, todavía faltan estudios experimentales para comparar resultados, además, todavía no existe una definición adecuada de velocidad crítica, puesto que las definiciones utilizan el criterio de la velocidad mínima para identificar *ASI [15] [28]* y otros criterios como la velocidad mínima para que ocurra un 50 [%] de deposición [29].

El Método de Kurochkin y Wu, mostró que a mayor temperatura previa al impacto, mayor fue la adhesión, en cambio, mientras mayor fue el ángulo de impacto, menor fue la adhesión, resultado concordante con la literatura [64]. Sin embargo, se destacó el hecho de mayores temperaturas a mayor ángulo, producto de fuerzas de roce, lo cual, haría interesante estudiar los efectos del ángulo entre 0 a 30° de impacto.

8. Bibliografía

[1] Bérubé, G. (2009). *DEVELOPMENT OF METASTABLE ALUMINUM ALLOY COATINGS AND PARTS FOR AUTOMOTIVE APPLICATIONS*. Master In Mechanical Engineering. University of Ottawa.

[2] Pawlowski, L. (1995), The Science and Engineering of Thermal Spray Coatings, John Wiley

& Sons, Chichester, Inglaterra.

[3] van der Wijst, M. (1992). *Shape Memory Alloys featuring Nitinol*. Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven.

[4] Dorfman, M.R (2002), Thermal Spray Processes, Advanced Materials & Processes,

Agosto, pp. 47-49.

[5] Fernández Urrutia, R. (2017). *Consolidation of Cermet Coatings by Cold Gas Dynamic Spraying*. Doctor of Philosophy in Mechanical Engineering. University of Ottawa.

[6] Degitz, Todd; Dobler, Klaus. "Welding Journal". *American Welding Society*. Revisado el 5 de Agosto de 2017.

[7] P. Fauchais, A. Vardelle, and B. Dussoubs (2001), Quo Vadis Thermal Spraying?, J. Therm.

Spray Technol, Vol. 10, pp. 44-66.

[8] Burgos Z., F. (2013). *ALEACIÓN NÍQUEL-TITANIO EN ENDODONCIA* [Ebook]. Valparaiso. Recuperado de:

<u>http://www.postgradosodontologia.cl/endodoncia/images/EspecialidadEndodoncia/Seminarios/2013</u> -2014/DocSeminarioNITI.pdf [Revisado el 7 de Julio de 2018].

[9] Sampath, S., & Herman, H. (1996). Rapid solidification and microstructure development during plasma spray deposition. *Journal Of Thermal Spray Technology*, *5*(4), 445-456.

[10] Sampath, S., Jiang, X., Matejicek, J., Prchlik, L., Kulkarni, A., & Vaidya, A. (2004). Role of thermal spray processing method on the microstructure, residual stress and properties of coatings: an integrated study for Ni–5 wt.%Al bond coats. *Materials Science And Engineering: A*, *364*(1-2), 216-231.

[11] Zou, Y. (2010). *MICROSTRUCTURAL STUDIES OF COLD SPRAYED PURE NICKEL, COPPER AND ALUMINUM COATINGS* (Master). McGill University.

[12] HVOF 용사. (2018). Recuperado de: http://iwsco.co.kr/?mid=page_LTnY70

[13] *Advanced Coating - Thermal Spraying - Plasma Spray Process.* (2018). Recuperado de <u>http://www.advanced-coating.com/english/spraying-plasma.htm</u> [Revisado el 17 de Septiembre de 2018].

ME 6909-1 TRABAJO DE TÍTULO

[14] Inside Metal Additive Manufacturing. (2017). *cold spray additive manufacturing*. [online] Recuperado de: <u>http://www.insidemetaladditivemanufacturing.com/blog/high-pressure-cold-spray-additive-manufacturing</u> [Revisado el 17 de Noviembre de 2017].

[15] Assadi, H., Gärtner, F., Stoltenhoff, T. and Kreye, H. (2003). Bonding mechanism in cold gas spraying. *Acta Materialia*, 51(15), pp.4379-4394.

[16] Staker, M. (1981). The relation between adiabatic shear instability strain and material properties. *Acta Metallurgica*, 29(4), 683-689.

[17] Bae, G., Xiong, Y., Kumar, S., Kang, K., & Lee, C. (2008). General aspects of interface bonding in kinetic sprayed coatings. *Acta Materialia*, *56*(17), 4858-4868.

[18] Xie, J. (2014). *Simulation of cold spray particle deposition process* (Doctorado). l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon.

[19] Nikbakht, R., Seyedein, S., Kheirandish, S., Assadi, H., & Jodoin, B. (2018). Asymmetrical bonding in cold spraying of dissimilar materials. *Applied Surface Science*, 444, 621-632.

[20] Dykhuizen, R., Smith, M., Gilmore, D., Neiser, R., Jiang, X. and Sampath, S. (1999). Impact of High Velocity Cold Spray Particles. *Journal of Thermal Spray Technology*, 8(4), pp.559-564.

[21] Ramesh, K. (1993). Experimental techniques in the dynamics of deformable solids. Nueva York, N.Y: *The American Society of Mechanical Engineers*.

[22] José Alfonso Artero Guerrero. *Técnicas empleadas en la modelización numérica de problemas de interacción fluido-estructura*. Trabajo tutelado: Máster en Mecánica Estructural Avanzada.

[23] Ozel, T. and Karpat, Y., 2007, Identification of constitutive material model parameters for high strain rate metal cutting conditions using evolutionary computational algorithms, *Materials and Manufacturing Processes*, Vol. 22, pp. 659-667.

[24] Hassani-Gangaraj, M., Veysset, D., Champagne, V., Nelson, K., & Schuh, C. (2018). Adiabatic shear instability is not necessary for adhesion in cold spray. *Acta Materialia*, *158*, 430-439.

[25] Alkhimov AP, Papyrin AN, Kosarev VF, et al (1995), Method and device for coating.

[26] Alidokht, S., Manimunda, P., Vo, P., Yue, S. and Chromik, R. (2016). Cold spray deposition of a Ni-WC composite coating and its dry sliding wear behavior. *Surface and Coatings Technology*, 308, pp.424-434.

[27] Deribas, A. and Zakharenko, I. (1976). Determination of limiting collision conditions ensuring the welding of metals by explosion. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 11(1), pp.133-135.

[28] Grujicic, M., Zhao, C., DeRosset, W. and Helfritch, D. (2004). Adiabatic shear instability based mechanism for particles/substrate bonding in the cold-gas dynamic-spray process. *Materials & Design*, 25(8), pp.681-688.

[29] Schmidt, T., Assadi, H., Gärtner, F., Richter, H., Stoltenhoff, T., Kreye, H., & Klassen, T. (2009). From Particle Acceleration to Impact and Bonding in Cold Spraying. *Journal Of Thermal Spray Technology*, *18*(5-6), 794-808.

[30] Hassani-Gangaraj, M., Veysset, D., Nelson, K., & Schuh, C. (2018). *Supersonic Impact of Metallic Micro-particles* [Ebook]. Cambridge, Massachusetts. Recuperado de: <u>https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1612/1612.08081.pdf</u> [Revisado el 25 de Agosto de 2018].

[31] Moridi, A., Hassani-Gangaraj, S., & Guagliano, M. (2013). A hybrid approach to determine critical and erosion velocities in the cold spray process. *Applied Surface Science*, *273*, 617-624.

[32] Yin, S., Suo, X., Xie, Y., Li, W., Lupoi, R., & Liao, H. (2015). Effect of substrate temperature on interfacial bonding for cold spray of Ni onto Cu. *Journal Of Materials Science*, *50*(22), 7448-7457.

[33] Kurochkin YV, Demin YN, Soldatenknov SI. Chem Petrol Eng, (2002); 38(3-4):245.

[34] Wu, J., Fang, H., Yoon, S., Kim, H., & Lee, C. (2006). The rebound phenomenon in kinetic spraying deposition. *Scripta Materialia*, *54*(4), 665-669.

[35] Rubino, F., Astarita, A., Carlone, P., Genna, S., Leone, C., Memola Capece Minutolo, F., & Squillace, A. (2015). Selective Laser Post-Treatment on Titanium Cold Spray Coatings. *Materials And Manufacturing Processes*, *31*(11), 1500-1506.

[36] Wei, Y., Li, Y., Zhang, Y., Luo, X., & Li, C. (2018). Corrosion resistant nickel coating with strong adhesion on AZ31B magnesium alloy prepared by an in-situ shot-peening-assisted cold spray. *Corrosion Science*, *138*, 105-115.

[37] Cavaliere, P., Silvello, A., Cinca, N., Canales, H., Dosta, S., Garcia Cano, I. and Guilemany, J. (2017). Microstructural and fatigue behavior of cold sprayed Ni-based superalloys coatings. *Surface and Coatings Technology*, 324, pp.390-402.

[38] Aghasibeig, M., Monajatizadeh, H., Bocher, P., Dolatabadi, A., Wuthrich, R., & Moreau, C. (2016). Cold spray as a novel method for development of nickel electrode coatings for hydrogen production. *International Journal Of Hydrogen Energy*, *41*(1), 227-238.

[39] *European Federation of Periodontology*. (2018). Recuperado de: <u>https://www.efp.org/patients/dental-implants.html</u> [Revisado el 1 de Agosto de 2018].

[40] Vilardell, A., Cinca, N., Garcia-Giralt, N., Müller, C., Dosta, S., & Sarret, M. et al. (2018). Invitro study of hierarchical structures: Anodic oxidation and alkaline treatments onto highly rough titanium cold gas spray coatings for biomedical applications. *Materials Science And Engineering: C*, *91*, 589-596.

[41] Yu, Q., & Pan, T. (2017). Microstructural Modeling of Pitting Corrosion in Steels Using an Arbitrary Lagrangian–Eulerian Method. *Metallurgical And Materials Transactions A*, 48(5), 2618-2632.

[42] ABAQUS analysis. (2008). Providence, RI: ABAQUS Inc.

[43] Li, W., Zhang, C., Li, C. and Liao, H. (2009). Modeling Aspects of High Velocity Impact of Particles in Cold Spraying by Explicit Finite Element, Analysis. *Journal of Thermal Spray Technology*, 18(5-6), pp.921-933.

[44] Yin, S., Suo, X., Xie, Y., Li, W., Lupoi, R. and Liao, H. (2015). Effect of substrate temperature on interfacial bonding for cold spray of Ni onto Cu. *Journal of Materials Science*, 50(22), pp.7448-7457.

[45] Manap, A., Nooririnah, O., Misran, H., Okabe, T. and Ogawa, K. (2014). Experimental and SPH study of cold spray impact between similar and dissimilar metals. *Surface Engineering*, 30(5), pp.335-341.

[46] Coefficients Of Friction. (2018). Recuperado de:

http://www.roymech.co.uk/Useful_Tables/Tribology/co_of_frict.htm [Revisado el 15 de Julio de 2018].

[47] *Chapter 4: Phonons and Crystal vibration.* (2018). Recuperado de: <u>http://grdelin.phy.hr/~ivo/Nastava/CvrstoStanje/arhiva/udzbenici/Upali_Siriwardane/586c4.htm</u> [Revisado el 15 de Julio de 2018].

[48] Allain, R. (2012). *Young's modulus and the interatomic spring constant* [Video]. Recuperado de: <u>https://youtu.be/gZuv36F0f_k</u> [Revisado el 15 de Julio de 2018].

[49] Montheillet, F., Girard-Insardi, S., Desrayaud, C., & Le Coze, J. (2004). *INFLUENCE OF NIOBIUM ON THE DYNAMIC RECRYSTALLIZATION OF NICKEL*. Saint Etienne, France.

[50] T. L. Cottrell, *The Strengths of Chemical Bonds*, 2^{da} ed., Butterworth, Londres, 1958.

[51] Kundu, S., & Chatterjee, S. (2006). Effect of bonding temperature on interface microstructure and properties of titanium–304 stainless steel diffusion bonded joints with Ni interlayer. *Materials Science And Technology*, 22(10), 1201-1207.

[52] Hermann, K. (2011). Crystallography and surface structure (5^{ta} ed.). WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.

[53] Gong, C., Guo, F., & Yang, D. (2006). A study on lattice parameters of martensite in Ni–Ti–Ta shape memory alloys. *Journal Of Alloys And Compounds*, *426*(1-2), 144-147.

[54] *Properties: Nickel - Properties, Fabrication and Applications of Commercially Pure Nickel.* (2018). Recuperado de: <u>https://www.azom.com/properties.aspx?ArticleID=2193</u> [Revisado el 15 de Julio de 2018].

[55] *MatWeb - The Online Materials Information Resource*. (2018). Recuperado en: <u>http://www.matweb.com/search/datasheet.aspx?bassnum=METi00&ckck=1</u> [Revisado el 15 de Julio de 2018].

[56] *Nitinol Technical Specifications: Discover the Unique Properties of Nitinol. (2018).* Recuperado de: <u>http://jmmedical.com/resources/221/Nitinol-Technical-Properties.html</u> [Revisado el de 15 Julio de 2018].

[57] *Niquel (Ni) Propiedades químicas y efectos sobre la salud y el medio ambiente.* (2018). Recuperado en: <u>https://www.lenntech.es/periodica/elementos/ni.htm</u> [Revisado el 15 de Julio de 2018].

ME 6909-1 TRABAJO DE TÍTULO

[58] *Masa molar del Ti (titanio)*. (2018). Recuperado de <u>https://es.webqc.org/molecular-weight-of-</u> <u>Ti%28titanio%29.html</u> [Revisado el 15 de Julio de 2018].

[59] Severing, V., Tseplayaeva, A., Khandamirova, N., Priselkov, Y., Chernova, N., Golubtsov, I., & Luk'yanov, V. (1992). Saturated Vapour Pressure and Enthalpy of Sublimation of Nickel. *Mendeleev Communications*, *2*(3), 97-100.

[60] Shackelford, J. Introduction to materials science for engineers (8^{va} ed.). Chegg.

[61] Vo, P., Goldbaum, D., Wong, W., Irissou, E., Legoux, J., Chromik, R., & Yue, S. (2015). Coldspray processing of titanium and titanium alloys. *Titanium Powder Metallurgy*, 405-423.

[62] Pathak, S., & Saha, G. (2017). Development of Sustainable Cold Spray Coatings and 3D Additive Manufacturing Components for Repair/Manufacturing Applications: A Critical Review. *Coatings*, 7(8), 122.

[63] Q. Blochet, F. Delloro, F. N'Guyen, F. Borit, M. Jeandin, Influence of Spray Angle on Cold Spray with Al for the Repair of Aircraft Components - Heat Treating Society, *Thermal Spray 2014: Not Fiction: Thermal Spray the Key Technology in Modern Life!*. Desde: The International Thermal Spray Conference, May 21-23, (Barcelona, Spain), ASM International, 2014, p 2014

[64] Fernandez, S. (2018). *ANÁLISIS EXPLICÍTO - Tus Elementos Finitos*. Recuperado de: <u>http://sergioariasfernandez.com/analisis-explicito/</u> [Revisado el 29 de Agosto de 2018].

[65] *What is hourglass stiffness in ABAQUS?* (2018). Recuperado de: <u>https://www.researchgate.net/post/What_is_hourglass_stiffness_in_ABAQUS</u> [Revisado el 25 de Agosto de 2018].

[66] AbaqusTheoryGuide(6.14).(2018).Recuperadode:https://www.sharcnet.ca/Software/Abaqus/6.14.2/v6.14/books/stm/default.htm?startat=ch02s04ath19.html[Revisado el 8 de Noviembre de 2018].

[67] Isotropic, Hyperelastic-Plastic Mie-Grüneisen Material - OSUPDOCS. (2018). Recuperado de: <u>http://osupdocs.forestry.oregonstate.edu/index.php/Isotropic,_Hyperelastic-Plastic_Mie-Gr%C3%BCneisen_Material</u> [Revisado el 8 de Noviembre de 2018].

9. Anexos.

9.1. Herramientas de *Abaqus/Explicit*.

Abaqus/Explicit cuenta con un módulo de análisis explícito, considerado para modelos dinámicos de altas deformaciones con las siguientes características [64].

- Apto para altas tasas de deformaciones, por consiguiente, ideal para casos de colisiones.
- Simulaciones toman generalmente en el orden de 10.000 a 1.000.000 de incrementos, pero el coste computacional por incremento es relativamente pequeño.
- Están disponibles los resultados parciales de las simulaciones, mientras esta sigue ejecutándose.

Abaqus/Explicit utiliza la regla de integración para casos de dinámica de movimientos explicitada en las ecuaciones 9.1 y 9.2, obtenidas de la *Abaqus Theory Guide* [66]. La ecuación 9.1 muestra la velocidad y la ecuación 9.2 indica la nueva ubicación.

$$\dot{u}_{i+\frac{1}{2}} = \dot{u}_{i-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t_{i+1} - \Delta t_i}{2} \ddot{u}_i \tag{9.1}$$

$$u_{i+1} = u_i + \Delta t_{i+1} \dot{u}_{i+\frac{1}{2}} \tag{9.2}$$

Para resolución de problemas y obtención de soluciones, *Abaqus* resuelve ecuaciones de equilibrio de momentum dentro de un volumen de control V, con una frontera S, esta es la ecuación 9.3 [66]}.

$$\int_{S} t dS + \int_{V} f dV = 0 \tag{9.3}$$

t compone las fuerzas de la frontera *S* y *f* compone las fuerzas del volumen *V*. Las fuerzas de la frontera *t* se descomponen en el producto punto $< n, \sigma >$, donde σ es el vector de esfuerzos y *n* es su respectivo vector normal. Como lo anterior es un producto punto, se puede aplicar el Teorema de Gauss en la ecuación 9.3, obteniendo la ecuación 9.4, con las integrales con respecto al volumen *V*. Finalmente, se obtiene la ecuación 9.5, que es la forma diferencial de la ecuación de equilibrio de momentum [66].

$$\int_{V} \left(\frac{\partial}{\partial x}\right) \cdot \sigma + f dV = 0 \tag{9.4}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}\right) \cdot \sigma + f = 0 \tag{9.5}$$

Para obtener la forma débil de la ecuación 9.5, *Abaqus* utiliza el principio de tasa de trabajo virtual [66], donde la ecuación 9.4 es multiplicada por un campo de velocidad arbitrario δv .

$$\int_{V} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \sigma + f \right] \delta v \, dV = 0 \tag{9.4}$$

A través de resoluciones algebraicas, la ecuación de equilibrio de momentum se puede escribir utilizando el principio de trabajo virtual.

$$\int_{S} t dS + \int_{V} f dV = \int \sigma : \left(\frac{\partial \delta v}{\partial x}\right)$$
(9.6)

El principio de conservación de energía dice que la suma de la tasa de las energías potenciales y cinética de un cuerpo es igual a la tasa de trabajo realizado por las fuerzas f y t [66], dentro de Abaqus, se traduce en la ecuación 9.7.

$$\frac{d}{dt} \int_{V} \left(\frac{1}{2}\rho v \cdot v + \rho U\right) dV = \int_{S} v \cdot t dS + \int_{V} f \cdot v dV$$
(9.7)

Donde ρ es la densidad del material del cuerpo, U es la energía potencial por unidad de masa. La energía cinética E_K se define en la ecuación 9.8 y la energía potencial E_U se define en la ecuación 9.9 [66].

$$E_K = \int_V \frac{1}{2} \rho v \cdot v dV \tag{9.8}$$

$$E_U = \int_V \rho U dV \tag{9.9}$$

La energía potencial se transforma en energía de deformación, separada en energía elástica E_{el} y plástica E_{pl} , sin la presencia de energía producto de creep [66].

$$E_{el} = \int_0^t \left(\int_V \sigma : \dot{\varepsilon}_{el} dV \right) d\tau \tag{9.10}$$

$$E_{pl} = \int_0^t \left(\int_V \sigma: \dot{\varepsilon}_{pl} dV \right) d\tau \tag{9.11}$$

Donde σ es el vector de esfuerzos, $\dot{\varepsilon}_{el}$ la tasa de deformación elástica y $\dot{\varepsilon}_{pl}$ es la tasa de deformación plástica. Como se definió en la sección de Antecedentes, el esfuerzo se mide según deformación plástica con comportamiento descrito por la ecuación de Mie-Gruniesen y deformación plástica con comportamiento descrito con la ecuación de Johnson-Cook. La ecuación de Mie-Gruniesen [66] se muestra en la ecuación 9.12 y en la ecuación 9.13 se muestra la ecuación para cambios de temperatura para deformación elástica según Mie-Gruniesen [67].

$$\rho \frac{\partial E_m}{\partial t} = \frac{p}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + S: \dot{\varepsilon}_{el}$$
(9.12)

Donde ρ es la densidad del material, E_m es la energía por unidad de masa, p es la presión hidroestática y S es la matriz de esfuerzos de corte.
$$dT = -\frac{V}{V_0} T \Gamma_0 \dot{V} \tag{9.13}$$

Donde T es la temperatura, V es el volumen del material, V_0 es el volumen inicial y \dot{V} es la tasa de volumen en el tiempo.

Abaqus/Explicit cuenta con un módulo llamado *Dynamic-Temperature-displacement Explicit [42]*, permitiendo realizar cálculos mecánicos y térmicos simultáneamente. La interacción partículasubstrato se definió como *Contact pairs [41]*, permitiendo definir a la superficie de la partícula y la superficie superior del substrato como parejas de contacto. Se definió *Hard Contact [42]*, lo cual permitió las siguientes suposiciones [18].

- No fue permitida la penetración entre superficies.
- No se contó con un límite de fuerza de contacto entre superficies.
- No se transmitió presión de contacto mientras las superficies no estuvieran en contacto.

Las condiciones de contacto para *Hard Contact* son las siguientes, donde p es la presión de contacto y h es la distancia de superposición entre superficies de contacto [66].

$$p = 0, si h < 0$$

 $h = 0, si p > 0$

Las condiciones de restricción de contacto se muestran en la ecuación 9.14.

$$\delta \pi = \delta p h + p \delta h \tag{9.14}$$

Como la fricción genera pérdidas por calor, *Abaqus* cuenta con las siguientes ecuaciones para calcular calor por fricción. Estas ecuaciones son para contacto entre dos superficies.

$$q_1 = q_k - f_1 q_g (9.15)$$

$$q_2 = q_k - f_2 q_g (9.16)$$

Donde q_1 y q_2 son las energías calóricas disipadas de la superficie 1 y 2 respectivamente. f_1 y f_2 son los factores de peso que indican cuánto calor va a cada superficie. q_k es el calor por conducción. Y q_q es el calor generado por fricción.

$$q_g = \mu \tau \frac{\Delta s}{\Delta t} \tag{9.17}$$

Donde Δs es la tasa de deslizamiento [66]. *Abaqus* utiliza el método de Garlekin para llegar a la forma débil de la ecuación de energía calórica disipada.

$$\delta \pi = \int_{S} \left(\delta \Delta \theta q_{k} - \delta \hat{\theta} q_{g} \right) dS \tag{9.18}$$

$$\hat{\theta} = f_1 \theta_1 + f_2 \theta_2 \tag{9.19}$$

Donde θ_1 y θ_2 es la temperatura de la superficie 1 y 2 respectivamente.

Además del mallado Arbitrary *Lagrangian Eulerian (ALE)*, otra manera de controlar la cantidad de deformación a la que son sometidos los elementos, es el *Distortion Control*, donde se define el *Lenght Ratio*, que es una razón de reducción de la distancia de deformación del elemento, razón perteneciente entre 0,1 a 1 [43]. Cabe destacar que el mallado *ALE* y el Distortion Control no son compatibles el uno con el otro [43].

Otra opción es el *Hourglass Control*, permitiendo controlar el *Hourglass Effect*, consistente en la alta deformación del elemento, tal que su forma cambia drásticamente [65]. *Hourglass Control* cuenta con distintas opciones; *Enhanced*, *Stiffness*, *Viscous*, *Combined* [42].

En cuanto al mallado ALE, se detalla su funcionamiento con *Frequency* (especifica cada cuántos incrementos, realiza desplazamientos de malla con ALE) y con *Remeshing Sweeps per Increment* (n° de desplazamientos de malla por incremento).

Improve Aspect Ratio se concentra en evitar las excesivas deformaciones en los elementos, *Enhanced Algorith with evolving geometry* se encarga de mejorar el aspecto de la malla, cada vez que se realiza un movimiento de malla, esta se basa en los nodos que se tenían en el momento antes de realizar el movimiento de malla o barrido (*Remeshing Sweep*).

Initial Feature Angle θ_T indica cuál es el ángulo más agudo del elemento para realizar un movimiento de malla, es decir, si el ángulo es más agudo, se mueve la malla.



Figura 9.1. Esquematización del funcionamiento de *Initial Feature Angle*, donde si el ángulo θ es menor que θ_T , se desplaza el mallado [18].

En caso de haber movimiento de malla, *Abaqus/Explicit* formó nuevas mallas, por lo que transmite los datos de salida desde la vieja malla a la nueva malla, producto del movimiento de malla. Para esto, *Abaqus/Explicit* realiza una interpolación de datos de segundo orden, llamada *Second Order Advection [18]*, y *Half Index Shift [18]*, se encarga de desplazar los nodos, conservando el momentum; esta herramienta traslada los cálculos de momentum desde los nodos al centro para después, devolverlos a los nodos, ayudando a mantener el momentum.

PEEQ consiste en la deformación plástica equivalente, análoga al esfuerzo de Von Mises, cuantificada en la Ecuación (10.1) [40].

$$PEEQ = \sqrt{\frac{2}{3}\epsilon_{IJ}^2}$$
(9.20)

Donde ϵ_{IJ} es la deformación de corte.

9.2. Simulaciones níquel sobre níquel.



Tabla 9.1. Imágenes impacto partículas de níquel sobre níquel, según la velocidad y tiempo de impacto.



Tabla 9.2. Imágenes impacto partículas de níquel sobre níquel, según la temperatura y tiempo de impacto.



Tabla 9.3. Imágenes impacto partículas de níquel sobre níquel, según ángulo y tiempo de impacto.

9.3. Simulaciones titanio sobre titanio.



Tabla 9.4. Imágenes impacto partículas de titanio sobre titanio, según velocidad y tiempo de impacto.



Tabla 9.5. Imágenes impacto partículas de titanio sobre titanio, según la temperatura y tiempo de impacto.



Tabla 9.6. Imágenes impacto partículas de titanio sobre titanio, según ángulo y tiempo de impacto.

9.4. Simulaciones de Níquel sobre titanio.



Tabla 9.7. Imágenes impacto partículas de níquel sobre titanio, según velocidad y tiempo de impacto.



Tabla 9.8. Imágenes impacto partículas de níquel sobre titanio, según la temperatura y tiempo de impacto.



Tabla 9.9. Imágenes impacto partículas de níquel sobre titanio, según ángulo y tiempo de impacto.

9.5. Simulaciones titanio sobre níquel.



Tabla 9.10. Imágenes impacto partículas de titanio sobre níquel, según velocidad y tiempo de impacto.



Tabla 9.11. Imágenes impacto partículas de titanio sobre níquel, según la temperatura y tiempo de impacto.



Tabla 9.12. Imágenes impacto partículas de titanio sobre níquel, según ángulo y tiempo de impacto.

9.6. Estudios de Temperatura y Esfuerzo de Von Mises de la Partícula.



9.5.1. Níquel sobre níquel.

Figura 9.2. Comparación de temperatura T [k] (rojo) y esfuerzo de Von Mises S [MPa] (azul) a diferentes velocidades de impacto. a) 400 [m/s], b) 500 [m/s], c) 600 [m/s], d) 700 [m/s] y e) 800 [m/s]. La línea vertical demarcó el tiempo en que la velocidad fue la mínima durante el impacto, con el valor sobre la línea.



Figura 9.3. Comparación de temperatura T [k] (rojo) y esfuerzo de Von Mises S [MPa] (azul) a diferentes temperaturas previas al impacto. a) 600 [k] y b) 900 [k]. La línea vertical demarcó el tiempo en que la velocidad fue la mínima durante el impacto, con el valor sobre la línea.



Figura 9.4. Comparación de temperatura T [k] (rojo) y esfuerzo de Von Mises S [MPa] (azul) a diferentes ángulos de impacto. a) 30 [°], b) 45 [°] y 60 [°]. La línea vertical demarcó el tiempo en que la velocidad fue la mínima durante el impacto, con el valor sobre la línea.



Figura 9.5. Comparación de temperatura T [k] (rojo) y esfuerzo de Von Mises S [MPa] (azul) a diferentes velocidades de impacto. a) 400 [m/s], b) 500 [m/s], c) 600 [m/s], d) 700 [m/s] y e) 800 [m/s]. La línea vertical demarcó el tiempo en que la velocidad fue la mínima durante el impacto, con el valor sobre la línea.



Figura 9.6. Comparación de temperatura T [k] (rojo) y esfuerzo de Von Mises S [MPa] (azul) a diferentes temperaturas previas al impacto. a) 600 [k] y b) 900 [k]. La línea vertical demarcó el tiempo en que la velocidad fue la mínima durante el impacto, con el valor sobre la línea.



Figura 9.7. Comparación de temperatura T [k] (rojo) y esfuerzo de Von Mises S [MPa] (azul) a diferentes ángulos de impacto. a) 30 [°], b) 45 [°] y 60 [°]. La línea vertical demarcó el tiempo en que la velocidad fue la mínima durante el impacto, con el valor sobre la línea.



9.5.3. Níquel sobre titanio.

Figura 9.8. Comparación de temperatura T [k] (rojo) y esfuerzo de Von Mises S [MPa] (azul) a diferentes velocidades de impacto. a) 400 [m/s], b) 500 [m/s], c) 600 [m/s], d) 700 [m/s] y e) 800 [m/s]. La línea vertical demarcó el tiempo en que la velocidad fue la mínima durante el impacto, con el valor sobre la línea.



Figura 9.9. Comparación de temperatura T [k] (rojo) y esfuerzo de Von Mises S [MPa] (azul) a diferentes temperaturas previas al impacto. a) 600 [k] y b) 900 [k]. La línea vertical demarcó el tiempo en que la velocidad fue la mínima durante el impacto, con el valor sobre la línea.



Figura 9.10. Comparación de temperatura T [k] (rojo) y esfuerzo de Von Mises S [MPa] (azul) a diferentes ángulos de impacto. a) 30 [°], b) 45 [°] y 60 [°]. La línea vertical demarcó el tiempo en que la velocidad fue la mínima durante el impacto, con el valor sobre la línea.



Figura 9.11. Comparación de temperatura T [k] (rojo) y esfuerzo de Von Mises S [MPa] (azul) a diferentes velocidades de impacto. a) 400 [m/s], b) 500 [m/s], c) 600 [m/s], d) 700 [m/s] y e) 800 [m/s]. La línea vertical demarcó el tiempo en que la velocidad fue la mínima durante el impacto, con el valor sobre la línea.



Figura 9.12. Comparación de temperatura T [k] (rojo) y esfuerzo de Von Mises S [MPa] (azul) a diferentes temperaturas previas al impacto. a) 600 [k] y b) 900 [k]. La línea vertical demarcó el tiempo en que la velocidad fue la mínima durante el impacto, con el valor sobre la línea.



Figura 9.13. Comparación de temperatura T [k] (rojo) y esfuerzo de Von Mises S [MPa] (azul) a diferentes ángulos de impacto. a) 30 [°], b) 45 [°] y 60 [°]. La línea vertical demarcó el tiempo en que la velocidad fue la mínima durante el impacto, con el valor sobre la línea.